

Planare Scherung kohäsiver und zeitverfestigender granularer Materie mit der Diskrete-Elemente-Methode

Von der Fakultät für Physik
der Universität Duisburg-Essen
genehmigte Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

2017

von
Alexander Weuster
aus Voerde

1. Gutachter: Prof. Dr. D. E. Wolf
2. Gutachter: Prof. Dr. A. Kwade

eingereicht am: 21. Dezember 2016
Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juni 2017

Meinen Eltern
Ingrid Kempken-Weuster
& Karl-Heinz Weuster

Zusammenfassung

Diese Arbeit widmet sich dem quasistatischen Fließverhalten kohäsiver, zeitverfestigender granularer Materie. Ausgangspunkt bildet eine zeitabhängige Adhäsionskraft zwischen Partikeln, die mit der charakteristischen Zeit t_c gegen einen Sättigungswert strebt. Grundlegende Aspekte des Fließverhaltens werden durch Parameterstudien in einem 2D Modell mit biperiodischen Randbedingungen untersucht. Des Weiteren wird das Fließverhalten von Kaliumchloridpulver in Simulationen mit der Diskrete-Elemente-Methode modelliert.

Im Rahmen des zweidimensionalen Modells wird eine bisher unbekannte Eigenart quasistatischer Deformation mit biperiodischen Randbedingungen enthüllt: eine periodisch auftretende Rotation des Systems, welche weder auf Reibung noch Adhäsionskräfte zurückzuführen ist. Außerdem wird die Existenz einer charakteristischen Clustergröße und fraktalen Substruktur in gescherter kohäsiver granularer Materie geprüft sowie Fluktuationen der lokalen Scherrate analysiert. Durch Variation der Verfestigungszeit wird gezeigt, dass der stationäre Zustand in den Grenzfällen $t_c \rightarrow 0$ und $t_c \rightarrow \infty$ dem stationären Fließen eines kohäsiven, bzw. kohäsionslosen Schüttguts entspricht. Beide Zustände zeigen bei biperiodischen Randbedingungen im zeitlichen Mittel ein homogenes Deformationsfeld. Es werden weder stationäre Scherbänder, noch eine Restverbackung bei verfestigten Proben beobachtet. Entspricht hingegen die charakteristische Verfestigungszeit der inversen Scherrate, lokalisiert die Scherung in stationären Scherbändern, deren Breite mit t_c wächst. Dieser Effekt sowie das Ausbleiben von Scherlokalisierung in den beiden Grenzfällen werden auf Basis des Prinzips minimaler Energiedissipation begründet. Darüber hinaus kann Kontraktanz beobachtet werden, d.h. eine höhere Dichte in den Scherbändern im Vergleich zur mittleren Dichte.

Die Modellierung von Kaliumchlorid inklusive Kalibrierung und Validierung offenbart weitere interessante Aspekte kohäsiver, zeitverfestigender granularer Materie. Die Adhäsionskraft von Kaliumchlorid gehorcht einer vergleichbaren Zeitabhängigkeit. Im Gegensatz zum 2D-Modell gibt es jedoch auch im unverfestigten Pulver eine attraktive Wechselwirkung zwischen den Partikeln. Es wird ein Modell für die kritische Zustandslinie von unverfestigtem Kaliumchloridpulver vorgeschlagen auf Basis dessen eine sukzessive Parameterkalibrierung möglich ist. Obwohl die Partikel plastisch deformieren, bedingt erfolgreiche Validierung eine lastunabhängige Adhäsionskraft im Fall keiner Zeitverfestigung. Außerdem können in diesem Grenzfall stationäre Scherbänder im Haufwerk beobachtet werden. Der stationäre Fließzustand verfestigter Proben scheint hingegen nicht mehr durch die Zeitverfestigung beeinflusst zu werden.

Abstract

This thesis is devoted to quasistatic rheology of cohesive, time consolidating granular matter. Utilizing interparticle adhesion forces which grow on a characteristic timescale t_c towards a saturation value, we perform plane shear simulations in two and three dimension by means of the discrete element method. While basic phenomena are explored by a parameteric study with biperiodic boundary conditions in 2D, the 3D part focuses on modelling a specific powder: potassium chloride (KCl).

Within the 2D study, a yet unreported phenomenon of quasistatic deformation with biperiodic boundary conditions is revealed: a periodically occuring rotation of the whole system, which is neither caused by adhesion, nor by frictional forces. Aside from this rotation, we analyze characteristic clusters sizes, fractal substructures and velocity fluctuations of the sheared cohesive bulk. By varying the consolidation time t_c we show, that the critical state in the limits $t_c \rightarrow 0$ and $t_c \rightarrow \infty$ is identical with the steady state of a cohesive and non-cohesive bulk solid, respectively. Both states exhibit, aside from fluctuations, a homogenous deformation field and no timeconsolidated (“caked”) contacts. If t_c is close to the average contact time (\propto inverse shear rate) on the contrary, stationary shearzones appear with a t_c dependent width. This phenomenon, together with the homogenous deformation in the limits $t_c \rightarrow 0$ and $t_c \rightarrow \infty$ can be ascribed to the principle of least dissipation of energy. Furthermore the volume fraction inside the shearzones exceed the mean volume fraction, hence we observe contraction instead of dilation.

Modelling of potassium chlorides also covers calibration and validation of the proposed contact model and reveals further aspects of the rheology of cohesive, time consolidating granular matter. While particle interaction obeys the same time dependency as used in the 2D simulations, a adhesion force in the limit contact time $\ll t_c$ has to be included as well. We propose a model for the critical state line (also know as termination locus) which enables a gradual calibration procedure. Even though KCl particles deform plastically, successful validation demands a load-indepentend adhesion force in the unconsolidated limit. Furthermore, due to the wall roughness, shear bands within the bulk can be observed in this limit. As in the 2D simulations, the steady state of consolidated KCl powders seems not to be affected by caked contacts as well.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	5
2.1. Kontinuumsbeschreibung	5
2.2. Diskrete-Elemente-Methode	11
3. Herstellung hochporöser, isotroper, fraktaler Packungen	19
4. Homogener Fluss	21
4.1. Modell und Simulationsmethode	22
4.2. Parameterwahl und natürliche Einheiten (in 2D)	30
4.3. Übergang zum Quasistatischen Fließen	34
4.4. Einfluss der Reibung	45
4.5. Einfluss der Kohäsion	48
4.6. Zeitverfestigung	56
5. Modellierung des Fließverhaltens von Kaliumchlorid	69
5.1. Experimentelle Produktcharakterisierung	70
5.2. Kontaktmodell	72
5.3. Wahl der Parameter und Kalibrierung	75
5.4. Validierung	85
5.5. Qualitative Analyse des Bruchverhaltens zementierter Proben	86
5.6. Zusammenfassung und Diskussion	88
6. Fazit	93
A. Anhang	99
A.1. Lineare Näherung	100
A.2. Modell zur plastischen Deformation von Oberflächen	112

Abbildungsverzeichnis

2.1. Skizze des Zustandsdiagramm nach Roscoe	8
2.2. Raum der Hauptspannungen	10
2.3. Skizze eines Kontakt zwischen zwei Partikeln	12
2.4. Skizze zur richtungsabhängigen Dichte-Korrelationsfunktion	15
3.1. Dichtekorrelation hochporöser Packungen in 2D und 3D	20
4.1. Skizze der Normalkraft	23
4.2. Skizzen zur Scherung einer 2D Konfiguration mit periodischen Randbedingungen.	29
4.3. Mittlere Geschwindigkeitsprofile	35
4.4. Geschwindigkeitskorrelationen mit abnehmender Scherrate	36
4.5. Modellierung der Korrelationsfunktion	38
4.6. Momentaufnahmen von $v_x(y)$ und Varianz in Abhängigkeit von $\dot{\gamma}$. . .	39
4.7. Geschwindigkeitsfeld mit Rotation	40
4.8. Zeitlicher Verlauf des max. Wirbelradius	42
4.9. Finite-Size-Analyse des quasistatischen Grenzfalls kohäsionsloser Materie	43
4.10. Einfluss der Gleitreibung auf Scherheterogenitäten	45
4.11. Momentaufnahmen der lokalen Scherrate für verschiedene μ	46
4.12. Korrelationsfunktion unter Variation von μ und Fouriertransformierte von $R_{\max}(t)$	47
4.13. Einfluss der Rollreibung auf Scherheterogenitäten	47
4.14. Einfluss der Kohäsion auf den Spannungstensor	49
4.15. Einfluss der Kohäsion auf die Struktur des Schüttguts: Packungsdichte & Koordinationszahl	50
4.16. Einfluss der Kohäsion auf die Struktur des Schüttguts: Kontaktverteilung	50
4.17. Kontaktanisotropie in Abhängigkeit von η	51
4.18. Einfluss der Kohäsion auf die Kontaktzeiten	52
4.19. Einfluss der Kohäsion auf die lokale Scherrate	53
4.20. Packungsdichte zeitverfestigender Schüttgüter	59
4.21. Anteil verbackener Kontakte	59
4.22. Momentaufnahmen des zementierten Kontaktnetzwerks	60
4.23. Varianz der lokalen Scherrate in Abhängigkeit von t_c	61
4.24. Packungsdichte scheraktiver Bereiche und makroskopischer Reibungskoeffizient	61

4.25. Gaußsches Scherratenprofil	64
4.26. Scherbandbreite als Variationsproblem	65
4.27. Scherbandbreite in Abhängigkeit der Verfestigungszeit	66
5.1. SEM Aufnahmen von Kaliumchlorid	70
5.2. Abscherschubspannung als Funktion der Lagerungszeit	71
5.3. Kontaktmodell für Kaliumchlorid	72
5.4. Bestimmung des Rollreibungskoeffizient	76
5.5. Scherzelle und Modellierung der kritischen Zustandslinie	78
5.6. μ_{makro} und Mobilisierung als Funktion von μ	80
5.7. Struktur des Schüttguts in Abhängigkeit von μ	81
5.8. μ_{makro} und Geschwindigkeitsprofile in Abhängigkeit von σ_{adh}	82
5.9. Strukturänderung durch zunehmende Adhäsionskraft	83
5.10. μ_{makro} beim Aufbrechen einer verbackenen Probe in Abhängigkeit von χ	84
5.11. Validierung der adhäsionsbestimmten Grenzfalls	85
5.12. Validierung des zementierungsbestimmten Grenzfalls	86
5.13. Packungsdichte und Anteil verbackener Kontakte beim Bruch	87
5.14. Momentaufnahmen der Kontaktzeitflächendichte beim Bruch	89
A.1. WDV der Schwingunsmoden unter Variation von α_n	104
A.2. Exemplarische Darstellung zweier Schwingunsmoden	105
A.3. Korrelationsfunktion und Korrelationslänge	106
A.4. Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten für verschiedene Dämpf- ungskoeffizienten	107
A.5. Strukturkenngößen unter Variation von η	107
A.6. WDV der Schwingunsmoden unter Variation von η	108
A.7. WDV der Schwingunsmoden unter Variation von N	109
A.8. Skizze des SOS-Modells	113
A.9. Nassi-Shneidermann-Diagramm	114
A.10. Rauigkeit	115
A.11. Zeitliche Entwicklung Oberfläche	116
A.12. Zeitliche Entwicklung von L_{mod}	117
A.13. Höhenverteilung im stationären Zustand	118
A.14. Plateaustatistik	119

Symbolverzeichnis

In dieser Arbeit werden viele verschiedene Symbole zur Bezeichnung von Variablen, Messgrößen und Parametern benutzt. Dazu gehören mikroskopische Parameter des Kontaktmodells, wichtige dimensionslose Größen und Felder der Kontinuumsmechanik. Einige Felder werden mit unterschiedlichen Symbolen bezeichnet, um im Fall einer inhomogenen Verteilung das lokale Feld vom Mittelwert über das gesamte System unterscheiden zu können (z.B. die lokale Scherrate $\dot{\Gamma}$ und die angelegte Scherrate $\dot{\gamma}$). Wenige Symbole haben in unterschiedlichen Kapiteln eine andere Bedeutung (z.B. χ , $\underline{\chi}$), wobei es im jeweiligen Kontext nicht zu Verwirrungen kommen sollte.

A_n	Entwicklungskoeffizient n -ter Ordnung der Kontaktverteilung
A_c	Fläche von Bereichen mit lokaler Scherrate $\dot{\Gamma} > \text{Var}(\dot{\Gamma})^{1/2}$
a_ℓ	Norm der Entwicklungskoeffizient $c_{\ell m}$ der Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$
A_{adh}	Effektive Fläche für die Adhäsionskraft von KCl im unverbackenen Fall
A_{cem}	Effektive Fläche für die Adhäsionskraft von KCl im verbackenen Fall
\mathcal{C}	Makroskopischer Kohäsionsterm der Mohr-Coulomb-Theorie
\mathcal{C}^*	Makroskopischer Kohäsionsterm der kritischen Zustandslinie
C_{ab}	Korrelationsfunktion zwischen den Größen a und b
d	Partikeldurchmesser
d_i	Durchmesser des Partikel i
D	Raumdimension
d_f	Fraktale Dimension
DK	Dichte-Korrelationsfunktion
F_n	Normalkraft zwischen Partikeln in Richtung \underline{n}_{ij}
F_t	Tangentialkraft zwischen Partikeln
F_{adh}	Adhäsionskraft zwischen Partikeln
$F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$	Maximale Adhäsionskraft zwischen Partikeln bei Zeitverfestigung
G	Plastisches Potential
$\underline{\underline{\mathcal{G}}}$	Viskositätsmatrix
h_p	Plateauhöhe im SOS-Modell
I	Inertialzahl

I_o	Trägheitsmoment eine Partikels
$\underline{\underline{\mathcal{K}}}$	Steifigkeitsmatrix
k_n	Normalsteifigkeit der Partikel
k_t	Tangentialsteifigkeit der Partikel
k_r	Steifigkeit der Rollreibungsfeder
L_x, L_y, L_z	Abmessung des Systems
L_{eq}	Gleichgewichtskontaktlänge des SOS-Modells
L_{el}	Charakteristische Länge der Kontaktfläche bei elastischer Entladung
L_{pl}	Charakteristische Länge der Kontaktfläche beim plastischen Fließen
L_p	Plateaulänge im SOS-Modell
\mathcal{M}	Lokaler Reibungskoeffizient
$\underline{\underline{\mathcal{M}}}$	Matrix der Massen und Trägheitsmomente der Partikel
\mathcal{M}_{min}	Minimaler Reibungskoeffizient im konstitutiven Gesetz
$\underline{M}_i^{(gleit)}$	Durch Gleitreibung verursachtes Drehmoment auf Partikel i
$\underline{M}_i^{(roll)}$	Durch Rollreibung verursachtes Drehmoment auf Partikel i
$\underline{M}_i^{(tor)}$	Durch Torsionsreibung verursachtes Drehmoment auf Partikel i
m_{eff}	Reduzierte Masse der Partikel
N	Partikelanzahl
N_c	Anzahl der Kontakte
N_R	Anzahl der Rattler
N_0	Anzahl Partikel ohne Kontakt
N_W	Anzahl der Partikel-Wand Kontakte
\mathcal{N}	Poissonzahl
$n(X)$	Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Größe X
\underline{n}_{ij}	Kontaktnormalenvektor zwischen Partikel i und j
P	Vorgegebene Normalspannung
\underline{r}_i	Position des Partikel i
\underline{r}_{ij}	Vektor $\underline{r}_i - \underline{r}_j$
r_{eff}	Reduzierter Radius der Partikel (Kontaktkrümmung)
r_{eff}^*	Um den Überlapp der Partikel korrigierter reduzierter Radius
R_{max}	Radius des größten Wirbels
t	Zeit
t_c	Charakteristische Verfestigungszeit eines Kontaktes
t_k	Kontaktzeit zwischen zwei Partikeln
\hat{t}_k	Feld der Kontaktzeitflächendichte
t_{Koll}	Dauer der zentralen Kollision zwischen zwei Partikeln
T	Gesamte Scherdauer
$T_{\alpha\beta}$	$\alpha\beta$ -Komponente des Trägheitstensors

v_{Koll}	Betrag der Kollisionsgeschwindigkeit zweier Partikel
\mathcal{W}	Dissipierte Energie
$x_{50,3}$	Median der Partikelmassenverteilung
\mathcal{Y}	Fließkriterium
$Y_{\ell m}$	Kugelflächenfunktion ℓ, m
Z	Koordinationszahl
Z_{mech}	Mechanische Koordinationszahl
α_n	Dimensionsloser Dämpfungskoeffizient $\gamma_n / \sqrt{k_n m_{\text{eff}}}$
α_t	Dimensionsloser Dämpfungskoeffizient $\gamma_t / \sqrt{k_t m_{\text{eff}}}$
$\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$	$\alpha\beta$ -Komponente der lokalen Scherrate
$\dot{\gamma}$	Globale Scherrate
γ_n	Dämpfungskoeffizient \propto Viskosität der Partikel
γ_r	Dämpfungskoeffizient Rollreibungfeder
γ_t	Dämpfungskoeffizient der Tangentialbewegung eines Partikelstoßes
$\dot{\varepsilon}_{\alpha\beta}$	$\alpha\beta$ -Komponente des Deformationsratentensors
$\underline{\zeta}$	Tangentialverschiebung zweier Partikel in Kontakt
η	Kohäsionszahl
$\eta^{(\text{max})}$	Maximale Kohäsionszahl, d.h. Verhältnis aus $F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$ und $P \langle d \rangle$
λ	Fließgesetzparameter
μ	Coulomb-Reibungskoeffizient
μ_r	Rollreibungskoeffizient
μ_{tor}	Torsionsreibungskoeffizient
μ_{makro}	Makroskopischer Reibungskoeffizient
μ_{lin}	Innerer Reibungskoeffizient durch Linearisierung des Fließorts
μ_{cs}	Reibungskoeffizient der kritischen Zustandslinie
ν	Packungsdichte
ν_{max}	Maximale Packungsdichte im konstitutiven Gesetz
ξ	Überlapp der Partikel
ξ_{pl}	Plastische Deformation der Partikel
ξ_{max}	Maximaler Überlapp der Partikel
ρ	Dichte der Partikel (Feststoffdichte)
$\tilde{\rho}$	Dichte des Schüttguts
$\sigma_{\alpha\beta}$	$\alpha\beta$ -Komponente des Spannungstensors
$\sigma'_{\alpha\beta}$	$\alpha\beta$ -Komponente des spurlosen Spannungstensors
σ	Hydrostatischer Druck
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Eigenwerte des Spannungstensors

$\sigma_{1,\text{pre}}$	Größter Eigenwert des Spannungstensors nach Anscheren
σ_{pre}	Normalspannung beim Anscheren einer Probe
σ_{fail}	Normalspannung beim Abscheren einer Probe
σ_{pl}	Plastische Fließgrenze des Feststoffs
σ_{el}	Elastische Konstante des Feststoffs
σ_{adh}	Charakteristische Spannung von KCl im unverbackenen Fall
σ_{cem}	Charakteristische Spannung von KCl im verbackenen Fall
τ	Schubspannung
τ_{fail}	Maximales τ beim Abscherung einer Probe
$\tau_{\text{fail},0}$	Maximales τ beim Abscheren im adhäsionsbestimmten Grenzfall
$\tau_{\text{fail,max}}$	Maximales τ beim Abscheren im zementierungsbestimmten Grenzfall
τ_{rel}	Relaxationszeit des Haufwerks durch lineare Stabilitätsanalyse
φ_c	Anisotropierichtung der Kontaktverteilung
Φ	Coarse-graining-Funktion, hier Gauß-Funtion
$\underline{\chi}$	Auslenkung der Rollreibungsfeder
χ	Kalibrierungsparameter der effektiven Verbackungsfläche
ω	Frequenz im Fourierraum
$\underline{\omega}_i$	Winkelgeschwindigkeit des Partikels i
Ω	Zirkulation des normierten Geschwindigkeitsfeld

KAPITEL 1

Einleitung

Die Physik granularer Materie offenbart eine Vielzahl an spannenden Effekten [1, 2] und ist, obwohl es sich um ein mechanisches System handelt, längst nicht vollständig verstanden. Sand¹ ist wahrscheinlich das prominenteste Beispiel und liefert einen Eindruck dieser Vielfältigkeit. Den meisten Menschen aus dem Urlaub am Meer oder in Wüstennähe bekannt, liefert Sand, ähnlich wie ein Festkörper, festen Untergrund für Freizeitaktivitäten. Im Gegensatz zu Festkörpern kann die Ausbreitung von Schallwellen in Sand jedoch extrem nicht-linear sein [4, 5]. Dies ist vor allem bei der Erkundung von Untergrundgefahren oder der Erschließung von Erdölbrunnen mittels seismischer Tomographie zu berücksichtigen [6, 7]. Fügt man Sand etwas Wasser hinzu, wird er durch Kapillarbrücken kohäsiv [8, 9] und lässt sich zu exotischen Sandburgen formen. Ein anderes Extrem des mechanischen Verhaltens stellen Sanduhren dar: hier fließt Sand, ähnlich einer Flüssigkeit, von der oberen in die untere Hälfte. Im Gegensatz zur Sanduhr kann seine Fließfähigkeit aber auch katastrophale Folgen haben, wie z.B. bei Erdrutschen [10]. Sand ist ein wichtiger Massenrohstoff für die Wirtschaft, wo dieser als Beton weiterverarbeitet für Hoch- und Tiefbau eingesetzt werden kann. Nicht zuletzt deshalb wurde Sand vom Berufsverband deutscher Geowissenschaftler als Gestein des Jahres 2016 ausgezeichnet. Neben Sand werden auch andere Schüttgüter wie z.B. Kohle, Getreide und Pellets industriell transportiert, gelagert und weiterverarbeitet. Die Untersuchung der Fließfähigkeit granularer Materie lässt sich somit schon durch wirtschaftliche Aspekte motivieren: wie stark kann oder muss ich das gelagerte Schüttgut belasten, bis es anfängt zu fließen? Wie groß muss die Öffnung des Silos sein um eine Entleerung zu gewährleisten? Diese Fragen stellen nur Teilaspekte der zugrunde liegenden Problemstellung dar: Die Beziehung zwischen Deformation und Spannungszustand eines Schüttguts. Eine nicht triviale Aufgabe, wenn man bedenkt, dass es sich um ein ungeordnetes System aus vielen Partikeln mit dissipativer Wechselwirkung handelt und somit eine Dynamik fernab des Gleichgewichts. Zur Beschreibung des Flusses granularer Materie müssen Impuls- und Massenerhaltung durch sog. konstitutive Gesetze ergänzt werden [11]. Neben Experimenten und Kontinuumstheorien hat sich auch die Diskrete-Elemente-Methode (kurz: DEM) als wichtiges Standbein der Forschung erwiesen [12].

¹Sediment aus Mineralkörnern der Korngröße 0.063 – 2 mm [3]

Diese Arbeit widmet sich ausschließlich dem Grenzfall quasistatischer Deformation („Kriechen“), in welchem sich granulare Materie ähnlich wie ein Festkörper elastisch und plastisch deformieren lässt. In diesem Grenzfall sind sowohl Spannung als auch Dichte des Haufwerks unabhängig von der Deformationsgeschwindigkeit [11]. Darüber hinaus führt die Korrelation der Partikelbewegung innerhalb des Haufwerks zu heterogener Scherung. Die Deformation lokalisiert in Scherzonen bzw. Scherbändern, deren Breite von den benutzten Randbedingungen des Scherexperiments abhängt [13–15]. Zur Entwicklung konstitutiver Gesetze, welche alle diese Scherexperimente beschreiben, stützen sich DEM-Simulationen auf den homogenen Fluss repräsentativer Volumenelemente. Ein homogenes Deformationsfeld kann dem System dabei durch Scherung mit periodischen Randbedingungen (sog. *Lees-Edwards-Randbedingungen* [16]) aufgeprägt werden. Ob Lees-Edwards-Randbedingungen im quasistatischen Regime wirklich ein homogenes Deformationsfeld erzeugen und welche Eigenarten bei dieser Methode zu beachten sind, wird in Kap. 4 untersucht.

Besteht das Schüttgut aus Partikeln mit Durchmesser im Mikrometerbereich, sind Adhäsionskräfte zwischen den Partikeln zu berücksichtigen. Diese attraktive Partikelwechselwirkung beeinflusst sowohl die Struktur als auch das Fließverhalten granularer Materie [17]. Das Haufwerk wird poröser [18] und kann selbst ohne äußere Belastung agglomerieren und als Kollektiv agieren [19]. Ob sich im quasistatischen Grenzfall eine charakteristische, adhäsionskraftbedingte Clustergröße überhaupt von der Systemgröße (Größe des „Festkörpers“) unterscheiden lässt, soll in Kap. 4.5 untersucht werden. Spannend wird es bei Partikelgrößen im Nanometerbereich (sog. Feinstaub). Das große Verhältnis aus Oberfläche zu Volumen führt zu einer gesteigerten Reaktivität der Partikel. Im Gegensatz zu Sand ist unklar, ob die Wechselwirkung von Nanopartikeln noch mit Hilfe der Kontinuumsmechanik beschrieben werden kann [20, 21]. Nanopartikel aggregieren in teilweise fraktalen Clustern [22], die das mechanische Verhalten des Haufwerks beeinflussen [23, 24]. Entscheidet allein der Präparationsvorgang über die fraktale Dimension der Cluster? Gegenteiliges zeigten Schwager et al. [25] mit einem *Bottom-to-Top-Restructuring-Modell* [26], in dem zyklische Beanspruchung eines Nanopulvers zu einer präparationsunabhängigen fraktalen Substruktur führt. In dieser Arbeit wird ein geometrischer Algorithmus zur Erzeugung von Haufwerken mit fraktaler Substruktur verwendet (Kap. 3). Ob diese fraktale Substruktur unter mechanischer Belastung erhalten bleibt, oder sich eine andere, möglicherweise auch fraktale Substruktur bildet, soll in Kap. 4.5 untersucht werden.

Hochporöse, fraktale Strukturen können z.B. durch Flammensprühpyrolyse erzeugt werden und finden in der Sensortechnik Anwendung [27]. Die mechanische Stabilität solcher Strukturen kann durch Lagerung unter erhöhter Temperatur ($\approx 1/2 - 2/3$ der Schmelztemperatur) erhöht werden. Bei diesem, als Sintern bezeichneten, Prozess wachsen Feststoffbrücken zwischen den Partikeln. Sintern stellt einen Mechanismus der Zeitverfestigung dar. Im Allgemeinen verlieren die Partikel bei Sintervorgängen jedoch ihre Identität und verschmelzen vollständig [28], sodass eine Modellierung durch ein Ensemble von Kugeln nur für Frühstadien des Sinterns geeignet ist [29, 30]. Des Weiteren verursacht Sintern eine Restrukturierung des Haufwerks [31, 32]. In dieser Arbeit sollen Sinterprozesse deshalb nicht direkt berücksichtigt werden, auch wenn die Begriffe

„verbacken“ und „zementiert“ synonym für zeitverfestigt verwendet werden.

Neben Sintern gibt es eine Vielzahl von Mechanismen, die Zeitverfestigung granularer Materie verursachen [29]. Zucker ist ein berühmtes Beispiel aus dem Alltag: Trockener, grober Zucker ist freifließend. Lagert man Zucker jedoch in feuchter Umgebung, verbackt das Material und es entstehen Klumpen. Die Feuchtigkeit führt zu Flüssigkeitsbrücken zwischen den Partikeln, in welchen sich Zucker löst und bei Übersättigung wieder zwischen den Partikeln auskristallisiert [33]. Auch amorphe, wasserlösliche Feststoffe können so verbacken [34]. Außerdem können biologische und chemische Prozesse eine Haftkraftverstärkung verursachen [35], wie z.B. Oxidation bei Lebensmitteln oder die Umwandlung organischer Substanzen durch Mikroorganismen [36]. Sämtliche Verfestigungsmechanismen führen zu großen Problemen bei der Verarbeitung von Schüttgütern [37] und sind deshalb für die Verfahrenstechnik relevant [38]. Ein weiteres Fachgebiet, in dem Zeitverfestigung untersucht wird, ist die Bodenmechanik. In Böden führt die Ausfällung von Mineralien an Kontaktstellen zwischen Partikeln zu einer Haftkraftverstärkung. Dieser auch als Zementierung bekannte Prozess ist essentieller Bestandteil der Diagenese [39]. Zementierter Sand ist z.B. weit verbreitet in der kalifornischen Küstenregion und die Erforschung des mechanischen Verhaltens somit relevant für den urbanen Ausbau [40].

In dieser Arbeit wird das Fließverhalten zeitverfestigender granularer Materie untersucht. Dabei bilden sich Adhäsionskräfte in einer charakteristischen Zeit t_c . Ist t_c klein im Vergleich zur Kontaktzeit t_k der Partikel, sollte sich die Kontaktmechanik nicht von der rein adhäsiver Partikel ohne Zeitverfestigung unterscheiden. Dies definiert den adhäsionsbestimmten Grenzfall. Im anderen Grenzfall ($t_c \gg t_k$) ist die Entstehung von Adhäsionskräften während der Kontaktzeit vernachlässigbar. Adhäsionskräfte können lediglich durch gezielte Probenpräparation („Zementierung“) geschaffen werden. Man spricht vom zementierungsbestimmten Grenzfall. Als Arbeitshypothese soll überprüft werden, ob sich anhand dieser charakteristischen Verfestigungszeit kohäsive Schüttgüter in diese Grenzfälle kategorisieren lassen. Dies betrifft das Fließverhalten wie folgt: Während im adhäsionsbestimmten Grenzfall keine Scherzone ausgezeichnet sein sollte, könnte beim Bruch zementierter Proben der initiale Riss zur weiteren Scherdeformation verwendet werden. Außerdem ermöglicht die planare Scherung mit periodischen Randbedingungen in Scherrichtung große Scherdeformationen und damit die Untersuchung des diskutierten stationären Zustands zementierter Proben [41–44]. In Kap. 4 werden diese Fragen mit einem 2D-Modell und Lees-Edwards-Randbedingungen unabhängig von einem Wandeinfluss [45, 46] untersucht. Kap. 5 widmet sich hingegen der Modellierung eines realen zeitverfestigenden Schüttguts in DEM Simulationen: Kaliumchlorid. Hier werden Wände mit Mitnehmern zur Scherung verwendet, sodass die Ergebnisse eine wichtige Ergänzung zur Überprüfung der Arbeitshypothese darstellen.

KAPITEL 2

Grundlagen

2.1. Kontinuumsbeschreibung

Die riesige Partikelanzahl und teilweise sehr komplexe Partikel-Partikel Wechselwirkung verhindern eine Beschreibung des Schüttguts durch eine analytische Lösung aller Bewegungsgleichungen. Die Kenntnis aller Partikeltrajektorien ist jedoch auch gar nicht notwendig um praktische Fragestellungen zum Verhalten des Schüttguts zu beantworten (z.B. unter welcher Last das Schüttgut anfängt zu fließen?). Die theoretische Beschreibung des mechanischen Verhaltens stützt sich deshalb i.d.R. auf Kontinuums-theorien. In Analogie zu einer Flüssigkeit oder einem Festkörper wird das Ensemble aus Partikeln als Kontinuum behandelt. Zentrale Variablen dieser Beschreibung sind die ortsabhängigen Felder Dichte $\tilde{\rho}(\underline{r})$, Geschwindigkeit $\underline{v}(\underline{r})$ und Spannung $\sigma_{\alpha\beta}(\underline{r})$. Letztere ist ein Tensor, welcher den Impulsfluss durch Flächen quantifiziert, um eine körperunspezifische Kraft auszudrücken. Da in dieser Arbeit die Beschreibung granularer Materie durch die Diskrete-Elemente-Methode im Fokus steht, soll in diesem Abschnitt lediglich das grundlegende Problem der planaren Scherung granularer Materie formuliert sowie Grundzüge der Plastizitätstheorie vorgestellt werden. Letztere dient als Basis zur Beschreibung quasistatischer Deformation. Anstatt detailliert elastoplastische Kontinuumsmodelle einzuführen, sollen dabei primär Begrifflichkeiten geklärt werden.

2.1.1. Planare Scherung

Impuls- und Massenerhaltung stellen die grundlegenden physikalischen Gesetze zur Beschreibung des Flusses granularer Materie dar. Die Änderung der Impulsdichte ist dabei, unter Ausschluss von Volumenkräften (wie z.B. Gravitation), durch die Divergenz des Spannungstensors gegeben:

$$\tilde{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} \underline{v} + (\underline{v} \cdot \nabla) \underline{v} \right) = -\nabla \underline{\underline{\sigma}} \quad , \quad (2.1)$$

wobei diese Arbeit der Konvention positiver Kompressionsspannungen folgt und die Ortsabhängigkeit der Felder zur besseren Übersichtlichkeit weggelassen wurde. Massenerhalt lässt sich durch die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} + \nabla(\tilde{\rho} \underline{v}) = 0 \quad (2.2)$$

darstellen. In dieser Arbeit betrachten wir den Spezialfall planarer Scherung, d.h. einen Geschwindigkeitsgradienten in y -Richtung, und fordern deshalb Translationsinvarianz in Scherrichtung (x) sowie senkrecht zur Scherebene (z). Mit dem Ansatz $\underline{v} = v_x(y) \underline{e}_x$ reduziert sich Gl. (2.1) zu

$$\tilde{\rho} \frac{\partial}{\partial t} v_x = - \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{xy} \quad (2.3)$$

sowie $\partial_y \sigma_{yy} = 0$ und $\partial_y \sigma_{zy} = 0$. Aufgrund der konstanten Normallast $P \equiv \sigma_{yy}$ bietet sich der Übergang zum dimensionslosen Reibungskoeffizienten $\mathcal{M} = -\sigma_{xy}/P$ an. Außerdem kann bei bekannter Feststoffdichte ρ die Porosität bzw. Packungsdichte $\nu = \tilde{\rho}/\rho$ des Schüttguts betrachtet werden. Zusammen mit dem Partikeldurchmesser d bilden ρ und P eine mögliche Basis für natürliche Einheiten. Im Gegensatz zu rein elastischen Körpern gibt es bei der Deformation granularer Materie keine eindeutige Beziehung zwischen Spannung und Verzerrung, sodass zur Beschreibung i.d.R. Deformationsraten, definiert durch

$$\dot{\epsilon}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad , \quad (2.4)$$

verwendet werden. Deshalb wird im Folgenden statt des Geschwindigkeitsfeldes, dessen Gradient betrachtet. Für die planare Scherung ist die Scherrate $\dot{\Gamma} = \partial_y v_x$ relevant, sodass Gl. (2.3) in natürlichen Einheiten als

$$\nu \frac{\partial}{\partial t} \dot{\Gamma} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \mathcal{M} \quad (2.5)$$

dargestellt werden kann. Dennoch reichen Impuls- und Massenerhalt nicht aus, um das System vollständig zu beschreiben. Diese Lücke muss durch konstitutive Gesetze geschlossen werden. Dabei unterscheidet man abhängig von der Scherrate mehrere Regime. Eine dimensionslose Größe zur Quantifizierung des Fließzustandes stellt die Trägheitszahl [15]

$$I = \dot{\Gamma} \sqrt{\frac{m d^{D-2}}{P}} \quad (2.6)$$

dar, wobei m die Partikelmasse, d den Partikeldurchmesser und D die Raumdimension bezeichnet. Die Zeitskala $\sqrt{m d^{D-2}/P}$ kann als charakteristische Zeit der Bewegung eines Partikels unter Einwirkung von Druck P interpretiert werden. Gelegentlich wird anstatt I dessen Quadrat (*Savage Zahl* [47]), d.h. das Verhältnis aus Kollisionsdruck und Normaldruck P , zur Quantifizierung des Scherregimes benutzt [48, 11]. Im Regime großer $\dot{\Gamma}$ und kleiner Normallast P ($I \gg 1$) verhält sich das Haufwerk gasähnlich. Es stellt sich eine geringe Dichte ein und binäre Kollisionen dominieren das Fließverhalten. Dieses Regime lässt sich mit Hilfe der kinetischen Theorie [49, 50] beschreiben. Im Grenzfall $I \rightarrow 0$, d.h. bei großen Spannungen und geringeren Deformationsgeschwindigkeiten, ist das Haufwerk dicht gepackt. Die Partikel bilden ein langlebiges,

langreichweitig korreliertes [51, 52], extrem dissipatives Kontakt Netzwerk mit heterogener Kraftverteilung [53, 54]. Hier agiert das Haufwerk eher als Festkörper und lässt sich sowohl elastisch als auch plastisch deformieren. Der Übergang zum Festkörper, d.h. das Überschreiten der Dichte, ab welcher das Haufwerk ein endliches Schubmodul besitzt, wird auch als *Jamming-Übergang* bezeichnet [55]. Für dieses Regime können konstitutive Gesetze auf Basis der Plastizitätstheorie abgeleitet werden (siehe nächster Abschnitt). Da in Experimenten beide Regime, räumlich voneinander getrennt, gleichzeitig auftreten können, liegt eine große Herausforderung in der korrekten Beschreibung des Übergangs [56]. In diesem Übergangsregime fließt granulare Materie ähnlich wie eine Flüssigkeit mit scherratenabhängiger Viskosität [57], man spricht vom Regime des *dichten Flusses*. Auch wenn in den letzten Dekaden große Anstrengungen unternommen worden sind, den dichten Fluss granularer Materie theoretisch zu beschreiben [58–60], blieb eine mikroskopisch begründete Theorie aus. Beihilfe schaffen empirische Ergebnisse, die mit Hilfe von Experimenten und numerischen Studien systematisch gewonnen werden [61]. Von großer Bedeutung ist hier die numerische Studie von Da Cruz et al. [62], welche die planare, homogene Scherung eines repräsentativen Volumenelements unter Variation der Scherrate thematisiert. Interpretiert man die Ergebnisse im Rahmen einer lokalen Rheologie, gilt

$$\mathcal{M}(I) = \mathcal{M}_{\min} + b I \quad , \quad (2.7)$$

$$\nu(I) = \nu_{\max} - c I \quad , \quad (2.8)$$

wobei \mathcal{M}_{\min} , ν_{\max} , b und c materialspezifische Konstanten darstellen. Gl. (2.8) beschreibt eine weitere Besonderheit granularer Materie: Dilatanz. Erstmals von Reynolds 1885 bemerkt, vergrößern Schüttgüter unter Scherdeformation ihr Volumen [63]. Die Packungsdichte im Regime dichten Flusses hängt jedoch nur schwach von I ab ($c \approx 0.3$ im Vergleich zu $b \approx 1.1$ [62]). Mit Einschränkungen haben andere Studien diese konstitutiven Gesetze bestätigt [64–67], auch wenn es für das Regime $I \gtrsim 1$ Korrekturvorschläge gibt [68, 69]. Wie bereits die französische Forschergruppe Groupement De Recherche Milieux Divisés anmerkte, kann eine lokale Rheologie nicht alle Experimente korrekt beschreiben [15]. Aufgrund der zunehmenden Korrelation in der Bewegung von Partikeln sei vielmehr eine nicht-lokale Rheologie notwendig.

2.1.2. Quasistatischer Fluss, Plastizitätstheorie

Diese Arbeit behandelt die quasistatische Deformation granularer Materie ($I \rightarrow 0$). In diesem Regime sind \mathcal{M} und ν scherratenunabhängige Materialeigenschaften, wie sich in Experimenten [70, 71] und Simulationen [72, 15] herausstellt hat. Das Schüttgut ist verkeilt (engl. *jammed*) und verformt sich für kleine Verzerrungen näherungsweise rein elastisch bis zu einer Fließgrenze, ab welcher plastische Deformation einsetzt. Für große Verzerrungen lässt sich der elastische Anteil vernachlässigen. Im Folgenden betrachten wir das Schüttgut zunächst als einen homogenen, rein plastischen Körper, auch wenn im Gegensatz zur klassischen Plastizitätstheorie die Packungsdichte kein Parameter, sondern variabel ist [73]. Die Plastizitätstheorie stellt ein *Fließkriterium* und das *Fließgesetz* als konstitutive Gesetze. Das Fließkriterium \mathcal{Y} ist i.A. eine Funktion

der Komponenten des Spannungstensors $\sigma_{\alpha\beta}$ sowie der Packungsdichte ν und definiert durch $\mathcal{Y}(\sigma_{\alpha\beta}, \nu) = 0$ die kritische Spannung, ab welcher das Material anfängt zu fließen. Im Bilde der planaren Scherung definiert das Fließkriterium die notwendige Schubspannung τ , welche, bei vorgegebener Kompressionsspannung σ und Packungsdichte ν , zur Deformation des Materials aufgebracht werden muss.

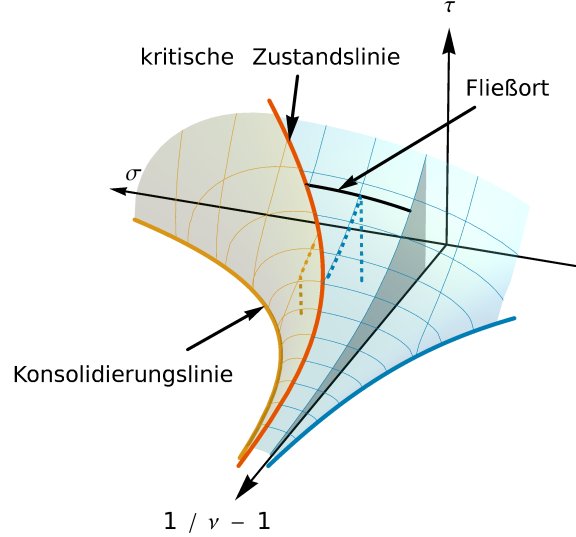


Abbildung 2.1.: Skizze des Zustandsdiagramm nach Roscoe in Anlehnung an [73]. Der Zustand wird definiert durch Kompressionsspannung σ , Schubspannung τ und Packungsdichte ν , hier aufgetragen als Porenzahl $1/\nu - 1$. Dargestellt sind die kritische Zustandslinie (rot), der Zusammenhang zwischen Zugfestigkeit und Porenzahl (blaue Linie), die Konsolidierungslinie (gelb) sowie die Fließfläche (blaue Fläche) und die Konsolidierungsfläche (gelb).

Abb. 2.1 skizziert das dreidimensionale Zustandsdiagramm nach Roscoe, in welchem alle möglichen Zustände unterhalb der Vereinigung aus *Fließfläche* (blau) und *Konsolidierungsfläche* (gelb) liegen. Die Schnittlinie dieser beiden Flächen bildet die *kritische Zustandslinie* (rot). Die Bedeutung dieser Flächen soll anhand eines Beispiels erklärt werden. Wir betrachten die Scherung einer Probe mit anfänglicher Packungsdichte ν_0 unter fester Kompressionsspannung σ_0 durch Anlegen einer konstanten Scherrate. Dabei sei zunächst $\tau = 0$. Die Schubspannung erhöht sich mit $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \sigma_0$ (parallel zur τ -Achse) solange, bis eine der beiden Flächen erreicht wird. Liegt der Punkt (σ_0, ν_0) unterhalb der Fließfläche (blau gestrichelte Kurve), durchläuft die Schubspannungsmessung ein Maximum τ_{fail} . Das Maximum entspricht der Schubspannung die zur plastischen Deformation der Probe (σ_0, ν_0) aufgebracht werden muss. Anschließend nimmt die Schubspannung bei steigendem Volumen und $\sigma = \sigma_0$ entlang der Fließfläche ab bis die kritische Zustandslinie (rot) erreicht ist. Man spricht von Dilatanz einer „überverfestigten“ Probe. Ist hingegen der Präparationspunkt unterhalb der Konsolidierungsfläche, handelt es sich um eine „unterverfestigte“ Probe (gelb gestrichelte Kurve). Sobald die Konsolidierungsfläche erreicht wird, erhöht sich die Schubspannung bei zunehmender Packungsdichte und $\sigma = \sigma_0$ entlang der Konsolidierungsfläche bis die kritische Zustandslinie erreicht ist. Im kritischen Zustand wird das Schüttgut ohne Volumenzu- oder abnahme geschert, ähnlich einer inkompressiblen Flüssigkeit.

Dieser Zustand definiert für gegebene Normalspannung σ_{pre} eine spezifische Packungsdichte und Schubspannung und dient in typischen Scherexperimenten als Referenzzustand [74, 75]. An dieser Stelle sei angemerkt, dass auch bisher unbeachtete Strukturvariablen (Koordinationszahl und Kontaktanisotropie) im kritischen Zustand einen eindeutigen Wert annehmen [76]. Die Präparation dieses Referenzzustand wird als „Anscheren“ einer Probe bezeichnet. Die Fließfläche wird anschließend abgetastet, indem die Probe im Referenzzustand durch Verringerung der Normalspannung auf $\sigma_{\text{fail}} < \sigma_{\text{pre}}$ entlastet wird und die maximale Schubspannung $\tau_{\text{fail}}(\sigma_{\text{fail}}, \sigma_{\text{pre}})$ der nun überverfestigten Probe bestimmt wird. Diese Prozedur wird als „Abscheren“ bezeichnet und kann für beliebige $\sigma_{\text{fail}} < \sigma_{\text{pre}}$, nach erneutem Anscheren, wiederholt werden. Die Beziehung $\tau_{\text{fail}}(\sigma_{\text{fail}}, \sigma_{\text{pre}})$ wird als *Fließort* bezeichnet und dient der Bestimmung der Druckfestigkeit eines Schüttguts [75] (schwarze Kurve in Abb. 2.1). In der *Mohr-Coulomb-Theorie* wird dieser Zusammenhang linearisiert, d.h. der *Fließort* durch

$$\tau_{\text{fail}}(\sigma_{\text{fail}}, \sigma_{\text{pre}}) = \mu_{\text{lin}} \sigma_{\text{fail}} + \mathcal{C}(\nu(\sigma_{\text{pre}})) \quad (2.9)$$

dargestellt. Ähnlich der Gleitreibung zwischen zwei Körpern wird die benötigte Schubspannung durch einen sog. *inneren Reibungskoeffizienten* μ_{lin} und einen präparationsabhängigen (makroskopischen) Kohäsionsterm $\mathcal{C}(\nu(\sigma_{\text{pre}}))$ charakterisiert. Während bei planarer Scherung die Schubspannung durch $-\sigma_{xy}$ und die Kompressionsspannung durch σ_{yy} gegeben ist, sollte ein Fließkriterium geometrieunabhängig gelten. Zur allgemeinen Beschreibung nutzt man bei der Formulierung eines Fließkriteriums deshalb die Invarianten des Spannungstensors. Drucker und Prager [77] verallgemeinerten die Mohr-Coulomb-Theorie durch Definition des Fließkriteriums

$$\mathcal{Y} = \tau + a \sigma - k \quad , \quad (2.10)$$

mit Konstanten a und k sowie dem *hydrostatischen Druck*

$$\sigma = \frac{1}{3} (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad , \quad (2.11)$$

welcher dem arithmetischen Mittel der Eigenwerte des Spannungstensors σ_1, σ_2 und σ_3 entspricht. Dabei ist k eine Art Kohäsionsterm welcher von der Präparation abhängt. Die Schubspannung wird mit Hilfe einer Norm des deviatorischen Anteils des Spannungstensors $\sigma'_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} - \sigma \delta_{\alpha\beta}$ durch

$$\tau = \sqrt{\frac{1}{2} \sigma'_{\alpha\beta} \sigma'_{\alpha\beta}} \quad (2.12)$$

definiert, wobei über doppelt auftretende Indizes summiert wird. Gleichung (2.10) ist eins von vielen Fließkriterien, welche die Literatur offeriert (siehe dazu Kapitel 5 in [11]). Das Lade-Duncan-Fließkriterium [78]

$$\mathcal{Y} = (3 \sigma)^3 - f(\nu) (\sigma_1 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3) \quad (2.13)$$

sei an dieser Stelle als Beispiel für ein erfolgreiches Fließkriterium zur Beschreibung kohäsionsloser granularer Materie erwähnt [79]. Oft werden Fließkriterien auch im

Raum der Hauptspannungen ($\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$) dargestellt [11]. In einer solchen Darstellung ist die Kompressionsspannung für einen beliebigen Punkt $A = (\sigma_{1A}, \sigma_{2A}, \sigma_{3A})$ proportional zur Projektion des Vektors \underline{OA} auf die Raumdiagonale, während der Abstand zur Raumdiagonalen der Schubspannung entspricht (siehe Abb. 2.2). Alle drei erwähnten Fließkriterien (Gl. (2.9), (2.10) und (2.13)) sind Beispiele für *offene Fließflächen*, d.h. modellieren lediglich die Fließfläche bzw. den Fließort und nicht die Konsolidierungsfläche.

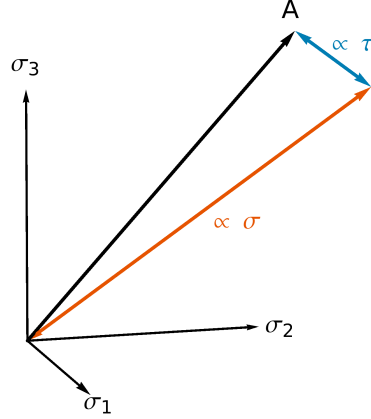


Abbildung 2.2.: Skizze zum Raum der Hauptspannungen.

Das zweite konstitutive Gesetz verbindet den Deformationsratentensor mit dem Spannungstensor und wird als *Fließgesetz* bezeichnet. Es kann gezeigt werden, dass sich der plastische Anteil des Deformationsratentensors stets aus einem plastischen Potential G ableiten lässt [80]:

$$\dot{\varepsilon}_{\alpha\beta}^{(pl)} = \lambda \frac{\partial G}{\partial \sigma_{\alpha\beta}} \quad , \quad (2.14)$$

wobei λ im Gegensatz zum konstitutiven Gesetz inkompressibler Flüssigkeiten keinen Materialparameter darstellt (siehe S. 84 ff. in [11]). Assoziiert man G mit dem Fließkriterium \mathcal{Y} , spricht man von einem *assoziierten Fließgesetz*. Nach Drucker und Prager ergibt sich durch Einsetzen von Gl. (2.10) in Gl. (2.14)

$$\dot{\varepsilon}_{\alpha\beta}^{(pl)} = \lambda \left(\frac{\sigma'_{\alpha\beta}}{2\tau} + \frac{a}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad . \quad (2.15)$$

Zur Interpretation dieser Gleichung betrachten wir die planare Scherung ($\underline{v} = v(y) \underline{e}_x \Rightarrow \dot{\varepsilon}_{xy} = \dot{\Gamma}/2$) eines isotropen Materials ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$). Aus $\dot{\varepsilon}_{\alpha z} = 0$ folgt $\sigma_{\alpha z} = 0$ sowie durch $\tau = |\sigma_{xy}|$, dass $\lambda = -\dot{\Gamma}$ gilt. Mit der Identifizierung $a \equiv -\mu_{lin}$, reduziert sich das Fließkriterium nach Drucker und Prager in diesem Fall auf das Mohr-Coulomb'sche. Ferner beinhaltet Gl. (2.15) durch

$$\dot{\varepsilon}_V^{(pl)} = \dot{\varepsilon}_{xx}^{(pl)} + \dot{\varepsilon}_{yy}^{(pl)} + \dot{\varepsilon}_{zz}^{(pl)} = \lambda a = \dot{\Gamma} \mu_{lin} \quad (2.16)$$

das Prinzip der Dilatanz. Es zeigt sich jedoch experimentell, dass $\dot{\varepsilon}_V^{(pl)}/\dot{\Gamma} < \mu_{lin}$ [80]. Die Identifizierung des plastischen Potentials mit der Fließfunktion ist also i.A. nicht

möglich und ein *nicht-assoziiertes Fließgesetz* muss verwendet werden. Meist wird statt a bzw. μ_{lin} ein weiterer Parameter zur Beschreibung der Dilatanz eingeführt.

In diesem Kontext wird gelegentlich auch die Verletzung des *Prinzip der Normalität* erwähnt. Für isotrope Materialien kann gezeigt werden, dass die Hauptachsen des Spannungs- und Deformationsratentensors parallel sind (sog. *Koaxialitäts-Bedingung* [11]). In diesem Fall ist es möglich, den Vektor $(\dot{\epsilon}_V^{(\text{pl})}, \dot{\Gamma})$, welcher den aktuellen Deformationsratentensor beschreibt, in die $\sigma\tau$ -Ebene des Zustandsdiagramm einzuzichnen. Die Verwendung eines assoziiertes Fließgesetz bedingt, dass $(\dot{\epsilon}_V^{(\text{pl})}, \dot{\Gamma})$ stets senkrecht auf dem Fließort steht. Dies ist i.A. für Schüttgüter nicht gegeben [73].

Des Weiteren führt die elastische Entspannung einer Probe zwischen An- und Abscheren zu einer Abnahme der Packungsdichte, sodass die gemessenen Fließorte lediglich die Projektionen einer Linie im dreidimensionalen $\tau\sigma\nu$ -Raum auf die $\tau\sigma$ -Ebene darstellen [73]. Im Allgemeinen müssen konstitutive Gesetze auch den elastischen Anteil der Deformation berücksichtigen. Im Sinne von Prandtl und Reuss wird die Deformationsrate als Summe eines elastischen und plastischen Anteils geschrieben [11]. Dabei verbinden die elastischen Konstanten den Spannungstensor mit dem elastischen Anteil des Deformationsratentensors. Der plastische Anteil kann, wie oben beschrieben, aus einem, dem Fließkriterium ähnlichen, plastischen Potential abgeleitet werden.

Unter Verwendung eines nicht-assoziierten Fließgesetz zeigten Rudnicki und Rice [81], dass Scherbänder als Resultat einer Instabilität der Beschreibung homogener Deformation gedeutet werden können. Vor allem überkonsolidierte Proben bevorzugen Scherzonen zur Deformation [80]. Die Theorie ist allerdings nicht in der Lage die Breite von Scherbändern korrekt vorherzusagen. Verschiedene heuristische Ansätze versuchen diese zusätzliche Längenskala (Scherbandbreite) in eine Kontinuumstheorie zu integrieren, wie z.B. die Cosserat-Theorie. In der klassischen Plastizitätstheorie ist der Drehimpuls implizit durch die Symmetrie des Spannungstensors erhalten. Keine externen Drehmomente wirken. Reibungskräfte sind jedoch von Natur aus dezentral und können einen asymmetrischen Spannungstensor verursachen. Dies wird bei der Modellierung granularer Materie durch ein Cosserat Kontinuum berücksichtigt [48]. Hier wird der Drall der Partikel (engl. *particle spin*) als zusätzliche kinetische Variable eingeführt und der Drehimpulserhalt durch eine gekoppelte Spannung (engl. *couple stress*) sichergestellt. Dieser *couple stress* wird mit Hilfe eines Längenparameters, welcher die Breite der Scherbänder beeinflusst [82, 83], bei der Formulierung des Fließkriteriums berücksichtigt.

2.2. Diskrete-Elemente-Methode

Durch die fortwährende Leistungssteigerung von Computern ist es in den letzten Dekaden möglich geworden, die Bewegungsgleichungen aller Partikel im Haufwerk numerisch zu lösen. Dabei steigt der Rechenaufwand mit der Partikelanzahl. Während anfangs wenige Partikel simuliert wurden, können mittlerweile sogar Partikelanzahlen

kleinskaliger Experimente realisiert werden [84]. Die Beschreibung des Schüttguts durch ein Ensemble diskreter Elemente (*Diskrete-Elemente-Methode*) hat sich so neben der Kontinuumsbeschreibung und Experimenten zu einem weiteren Stützpfeiler der Forschung an granularer Materie entwickelt. Es konnten konstitutive Gesetze vorgeschlagen [15], systematisch der Einfluss mikroskopischer Parameter auf das makroskopische Verhalten [85] sowie experimentell schwer zugängliche Problemstellungen untersucht werden [19]. Dabei eignen sich abhängig vom betrachteten Regime ($I \gg 1$ oder $I \ll 1$) verschiedene Varianten der DEM unterschiedlich gut. Im Regime $I \gg 1$ verhält sich das Ensemble aus Partikeln gasähnlich. Partikel fliegen auf geraden Bahnen bis sie durch eine Kollision („Ereignis“) ihre Richtung ändern. In diesem Regime eignet sich die ereignisgesteuerte Molekulardynamik (engl. *Event-driven Molecular Dynamics*) zur Beschreibung besonders gut [86]. Im Grenzfall quasistatischer Deformation sind die Partikel dauerhaft in Kontakt. Hier erweist sich die Kontaktdynamik-Methode [87] als besonders geeignet, welche für perfekt starre Partikel unter Verwendung eines Volumenausschlusskriteriums das Kraftnetzwerk iterativ berechnet.

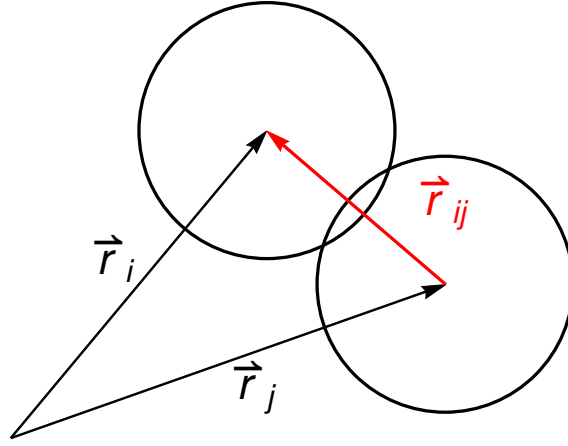


Abbildung 2.3.: Skizze zweier Partikel in Kontakt.

In dieser Arbeit betrachten wir kreis- bzw. kugelförmige, elastische und elastoplastische Partikel mit Durchmesser (d) und lösen nach Cundall und Strack [88] numerisch deren Bewegungsgleichungen. Dabei wechselwirken Partikel über paarweise Kräfte und Drehmomente, welche i.A. von deren Relativposition, Geschwindigkeit, Winkelgeschwindigkeit, Durchmesser und der Kontaktgeschichte (Reibung) abhängen. Der funktionale Zusammenhang, wie Kräfte und Drehmomente explizit von diesen aufgezählten Eigenschaften abhängen wird als *Kontaktmodell* bezeichnet. Betrachtet wir zwei wechselwirkende Partikel i und j , deren Positionen durch \underline{r}_i , \underline{r}_j und Durchmesser durch d_i , d_j beschrieben wird (Abb. 2.3). Mit Hilfe des Kontaktnormalenvektors

$$\underline{n}_{ij} = \frac{\underline{r}_{ij}}{|\underline{r}_{ij}|} = \frac{\underline{r}_i - \underline{r}_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|} \quad (2.17)$$

lässt sich die Wechselwirkung in einen Anteil parallel zu \underline{n}_{ij} (*Normalkraft*) und einen Anteil senkrecht zu \underline{n}_{ij} (*Tangentialkraft*) aufteilen. Die Normalkraft bestimmt die Reak-

tion der Partikel bei zentralem Stoß in Abhängigkeit vom Überlapp $\xi = (d_i + d_j)/2 - |\underline{r}_{ij}|$. Für die korrekte Beschreibung des schrägen Stoßes ist auch die Tangentialkraft notwendig, welche zusammen mit dem Drehmoment Reibung beinhaltet. In den meisten Kontaktmodellen werden Normal- und Tangentialkraft separat behandelt. Diese Vorgehensweise stützt auf die Annahme, dass die Normalspannung in der Kontaktfläche nicht durch die tangentialen Verschiebung der Partikel beeinflusst wird [89] und ist für Kontakte zwischen Körpern gleicher elastischer Eigenschaften sicherlich gerechtfertigt (siehe S. 203 in [90]).

Kontaktmechanik allein ist ein weites Feld fortwährender Forschung. Die Literatur offeriert eine Vielzahl teilweise sehr komplexer Kontaktmodelle für unterschiedliche Materialeigenschaften: Rein elastische [91], viskoelastische [92–94] oder elastoplastische [95–97] Partikel, mit oder ohne Adhäsionskraft¹ [98–101] und Reibung [102–104]. Die Kombinationsmöglichkeiten sind vielfältig, allerdings steigt mit zunehmender Komplexität auch die Anzahl der Parameter des Kontaktmodells. Zwar können einige dieser Parameter mit aufwändigen Experimenten bestimmt werden [105, 106], dennoch wird die vermeintlich akkurate Beschreibung der Partikelwechselwirkung durch Faktoren wie Oberflächenrauigkeit oder Schmutz in der Kontaktfläche gestört. Jedes Detail eines Experimentes in der Simulation abzubilden, gleicht einer Sisyphusaufgabe und hilft unter Umständen nicht dabei, die relevanten Aspekte der Simulation zu verstehen. Deshalb ist es ratsam ein problemspezifisches Kontaktmodell mit so wenig Parametern wie möglich zu wählen. In dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Kontaktmodelle verwendet, die im Detail an der jeweiligen Stelle erklärt werden. Die vorgestellten Kontaktmodelle wurden in das Open-Source-Programm *LAMMPS* (Large-scale Atomic Massively Parallel Simulator) [107, 108] integriert und Simulationen unter Verwendung des *Velocity-Verlet* Integrationschemas [109] durchgeführt. Der begangene Fehler durch die Verwendung der Geschwindigkeit in der Kraftberechnung $\underline{F}(\underline{r}(t + \Delta t), \underline{v}(t + \Delta t/2))$ wurde nicht quantifiziert. Da es sich jedoch um dissipative Systeme handelt (keine Energieerhaltung gefordert), die quasistatisch deformiert werden, sollte der Fehler vernachlässigbar sein.

2.2.1. Spannungstensor und Strukturkenngößen

Es bleibt die Einführung von kapitelübergreifend benutzten Messgrößen und Methoden zur Quantifizierung der mechanischen und strukturellen Eigenschaften. Zur Berechnung des Spannungstensors nutzen wir den üblichen Ausdruck [110, 111]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left(\sum_{i=1}^N m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N F_{ij\alpha} r_{ij\beta} \right) , \quad (2.18)$$

der sich aus Geschwindigkeiten und Kontaktkräften aller N Partikel innerhalb des Volumens V zusammensetzt. Der so definierte Spannungstensor ist aufgrund von *actio*

¹In dieser Arbeit werden Anziehungskräfte zwischen einzelnen Partikeln des Schüttguts als Adhäsionskräfte bezeichnet, da die Partikel nicht zwangsweise aus dem selben Material bestehen. Das Schüttgut als Kontinuum betrachtet wird hingegen als kohäsiv bezeichnet.

= *reactio* symmetrisch. Kontaktdrehmomente, welche eine Asymmetrie verursachen können, werden nicht berücksichtigt (siehe dazu [112, 113]). Kompressive Spannungen sind in der verwendeten Konvention positiv. Des Weiteren ist für quasistatische Deformation der Term $\propto v^2$ i.d.R. vernachlässigbar. Im Rahmen dieser Arbeit betrachten wir nur den mittleren Spannungstensor des Systems und werten Gl. (2.18) für das repräsentative Volumenelement $V = L_x L_y$ in 2D (und entsprechend in 3D) aus. Die Eigenwerte des mittleren Spannungstensors definieren in Kombination mit Gl. (2.11) und (2.12) den makroskopischen Reibungskoeffizienten

$$\mu_{\text{makro}} \equiv \frac{\tau}{\sigma} \quad , \quad (2.19)$$

wobei für planare Scherung eines isotropen Materials $\tau = |\sigma_{xy}|$ und $\sigma = P$ gilt. Die Differenzierung zwischen lokalem (\mathcal{M}) und makroskopischem Reibungskoeffizient (μ_{makro}) bei planarer Scherung ohne Gravitation kann durchaus in Frage gestellt werden. Im stationären Zustand homogener Systeme sind beide Größen gleich, d.h. \mathcal{M} nicht ortsabhängig. Hier soll das Symbol μ_{makro} primär zur präzisen Beschreibung der gemessenen Größe eingeführt werden. Vor allem im Vergleich zum Gleitreibungskoeffizient μ wird so der Unterschied zwischen mikroskopischer (Kontakt zwischen Partikeln) und makroskopischer Skala (mechanisches Verhalten des Haufwerks) betont.

Neben der Kompressionsspannung beeinflusst auch die Struktur des Schüttguts sein mechanische Verhalten. Meist wird der Einfluss der Struktur bei der Formulierung des Fließkriteriums nur über die Packungsdichte ν berücksichtigt (siehe Abs. 2.1.2 sowie [73, 11, 114]). Es ist jedoch bekannt, dass auch Größen wie z.B. die Kontaktanisotropie wichtig für das Verhalten granularer Materie sind [76]. Experimentell sind diese Größen z.B. mit Hilfe von Computertomographie bestimmbar [115–117], auch wenn die Kontaktdetektion gerade bei μm großen Partikeln noch eine Herausforderung darstellt. Die Identifizierung eines vollständigen Satzes relevanter Strukturkenngößen ist eine wichtige Aufgabe bei der Erforschung des Fließverhaltens granularer Materie. Neben der Packungsdichte wird die Struktur in dieser Arbeit durch die Koordinationszahl sowie die Kontaktororientierung quantifiziert. Die mittlere Koordinationszahl

$$Z = \frac{2 N_c}{N} \quad (2.20)$$

wird durch die mittlere mechanische Koordinationszahl [118]

$$Z_{\text{mech}} = \frac{2(N_c - N_R + N_0)}{N - N_R} \quad (2.21)$$

ergänzt, wobei N die Partikelanzahl, N_c die Anzahl der Kontakte, N_0 die Anzahl der Partikel ohne Kontakt und N_R die Anzahl der sogenannten *Rattler* beschreibt. Als Rattler werden alle Partikel gewertet die weniger als zwei Kontakte besitzen, oder Teil einer Partikelkette sind, die mindestens an einem Ende nur einen Kontakt aufweist. Solche *dangling arms* sind jedoch erst bei kohäsiven Schüttgütern relevant.

Die Verteilung der Kontaktororientierungen, d.h. die Häufigkeit von Kontaktrichtungen, kann in einem Polardiagramm ($n(\varphi)$ in 2D), bzw. als Dichtefunktion auf der Einheitssphäre ($n(\varphi, \vartheta)$ in 3D) dargestellt werden. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der

Kontaktrichtung ist die Verteilungsfunktion π -symmetrisch. Um eine Anisotropie der Kontaktorientierung zu quantifizieren, kann die Kontaktverteilungsfunktion durch die Fourierreihe

$$n(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} A_k \cos(k(\varphi - \varphi_c)) \quad (2.22)$$

in 2D [54, 119], oder mit Hilfe von Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ in 3D (siehe Kapitel 5) approximiert werden. Dabei finden aufgrund der π -Symmetrie nur gerade Terme Berücksichtigung. Die Entwicklungskoeffizienten A_k sind ein Maß der Anisotropie, während φ_c die Anisotropierichtung auszeichnet. Die Einträge des häufig verwendeten *Fabric*-Tensors sind eng verknüpft mit diesen Entwicklungskoeffizienten [120]. In der Regel genügen die beiden Terme A_2 und A_4 zu Beschreibung der Anisotropie [121].

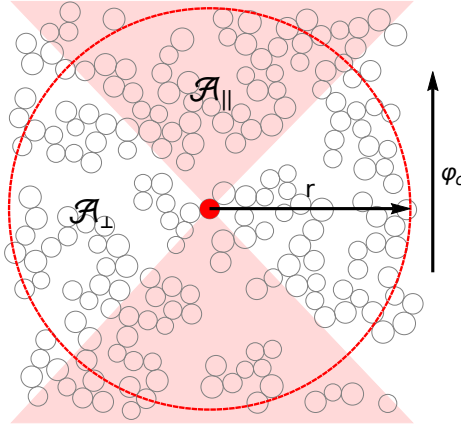


Abbildung 2.4.: Skizze zur richtungsabhängigen Dichte-Korrelationsfunktion, in welcher die Dichte in Flächen/Volumina (hier Kreissegmente) senkrecht und parallel zu einer ausgezeichneten Richtung φ_c gemessen wird. Es kann sowohl eine Richtungs- als auch eine Radienabhängigkeit quantifiziert werden.

Auch jenseits der Kontaktskala kann das Schüttgut eine Anisotropie aufweisen (z.B. anisotrope Porenräume, oder Kettenstrukturen). Um eine solche Anisotropie zu quantifizieren, schlagen wir die richtungsabhängige Messung der Dichte-Korrelationsfunktion

$$DK_{\mathcal{A}}(r) = \left\langle \frac{\int_{\mathcal{A}(r)} \tilde{\rho}(\underline{r}_i) \tilde{\rho}(\underline{r}_i + \underline{r}') d^N r'}{\rho^2 \mathcal{A}(r)} \right\rangle_{\underline{r}_i} = \left\langle \frac{\int_{\mathcal{A}(r)} \tilde{\rho}(\underline{r}_i + \underline{r}') d^N r'}{\rho \mathcal{A}(r)} \right\rangle_{\underline{r}_i} \quad (2.23)$$

vor, wobei ρ die Feststoffdichte der Partikel, $\tilde{\rho}(\underline{r})$ die Schüttgutdichte am Ort \underline{r} , \underline{r}_i das Zentrum des i -ten Partikels bezeichnet und \mathcal{A} eine Fläche (2d) bzw. ein Volumen (3d) mit Ausdehnung r darstellt. Diese integrierte Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion gibt die mittlere Packungsdichte in einem Bereich \mathcal{A} um ein Partikelzentrum an, d.h. entspricht bei einem homogenen Material im Bereich $r \gg 1$ der mittleren Packungsdichte und nicht Eins. Gemittelt wird über ausreichend viele Partikelzentren im Haufwerk. \mathcal{A} kann z.B. eine Kugel mit Radius r beschreiben, jedoch können auch Kegel oder andere Kugelsegmente benutzt werden um eine Richtungsabhängigkeit zu quantifizieren (siehe Abb. 2.4 sowie [122]). Bei fraktalen Nanopulvern gehorcht DK einem Potenzgesetz $\propto r^{d_f - D}$, wobei d_f die fraktale Dimension ist (siehe Kapitel 3 sowie [123]).

2.2.2. Übergang zum Kontinuum (coarse-graining)

Die Vergrößerung mikroskopischer Informationen (*coarse-graining*) ermöglicht einen Übergang zwischen der DEM und der Kontinuumsbeschreibung. Dabei werden Partikel und Kontaktvariablen durch Anwendung einer Vergrößerungsfunktion mit coarse-graining-Länge ℓ in kontinuierliche Felder übertragen. Dies ermöglicht einen Vergleich der Beschreibungen und vereinfacht die Darstellung von Simulationsergebnissen. In dieser Arbeit sollen Methoden des coarse-graining nicht untersucht, sondern lediglich bestehende Ansätze als Werkzeug benutzt werden. Für Details und Grundlagen sei an dieser Stelle auf die Arbeit von Goldhirsch [113] inkl. Referenzen sowie dessen Erweiterung für Wände [46, 124] verwiesen.

Grundlage bildet das Dichtefeld $\tilde{\rho}(\underline{r})$, welches durch

$$\tilde{\rho}(\underline{r}) = \sum_{i=1}^N m_i \Phi(\underline{r} - \underline{r}_i, \ell) \quad (2.24)$$

vergrößert werden kann. Dabei ist Φ die coarse-graining-Funktion mit Einheit Länge^{-D}. In dieser Arbeit wird als Φ stets eine Gauß-Funktion mit Breite ℓ benutzt. Unter Zuhilfenahme des Dichtefeldes kann aus der Impulsdichte das Geschwindigkeitsfeld

$$\underline{v}(\underline{r}) = \frac{1}{\tilde{\rho}(\underline{r})} \sum_{i=1}^N m_i \underline{v}_i \Phi(\underline{r} - \underline{r}_i, \ell) \quad (2.25)$$

berechnet werden. Die Existenz von Scherheterogenitäten äußert sich durch eine ortsabhängige Scherrate. Im Folgenden soll mit $\dot{\gamma}$ die am System angelegte Scherrate bezeichnet und das Feld der lokalen Scherrate durch

$$\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}(\underline{r}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} v_\beta(\underline{r}) \quad (2.26)$$

berechnet werden, d.h. durch numerische Differentiation des gemessenen Geschwindigkeitsfeldes (Gl. (2.25)). In Kapitel 4 betrachten wir das Feld der lokalen Scherrate und damit eine räumliche Verteilung von Messpunkten. Um Fluktuationen des Feldes zu quantifizieren, berechnen wir das zweite Moment, welches im Folgenden als Varianz bezeichnet werden soll, durch

$$\text{Var}(\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}) = \mathbb{E}[(\dot{\Gamma}_{\alpha\beta})^2] - \left(\mathbb{E}[\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}] \right)^2, \quad (2.27)$$

wobei der Erwartungswert eines Feldes f im betrachteten Volumen durch ein räumliches Mittel, d.h.

$$\mathbb{E}[f] = \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} f(x, y) dx dy \quad (2.28)$$

in 2D (und entsprechend in 3D) berechnet wird. Ferner ermöglicht das Geschwindigkeitsfeld die Bestimmung einer kontinuierlichen, räumlichen Korrelationsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen

$$C_{v'_\alpha v'_\alpha}(\Delta \underline{r}) = \frac{\mathbb{E}[v'_\alpha(\underline{r}) v'_\alpha(\underline{r} + \Delta \underline{r})]}{\sqrt{\mathbb{E}[(v'_\alpha)^2(\underline{r})] \mathbb{E}[(v'_\alpha)^2(\underline{r} + \Delta \underline{r})]}} \quad (2.29)$$

wobei $v'_\alpha(\underline{r})$ die α -Komponente der Geschwindigkeitsfluktuationen am Ort \underline{r} bezeichnet. Diese Funktion misst die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen mit Distanz $\Delta \underline{r}$. Für homogene planare Scherung ist $v'_\alpha(\underline{r}) = \underline{v}(\underline{r}) - \dot{\gamma} y \underline{e}_x$, was ebenfalls im Kapitel 4 Anwendung findet.

KAPITEL 3

Herstellung hochporöser, isotroper, fraktaler Packungen

Hinweis: Die Ergebnisse dieses Kapitels wurden in [122] veröffentlicht.

Mit abnehmender Partikelgröße steigt das Verhältnis aus Adhäsions- und Gewichtskräften und somit die Porosität granularer Packungen [18]. Bei Partikelgrößen im Nanometerbereich kann die Porosität dabei Werte bis zu 95 % annehmen [27], was auf eine fraktale Struktur hindeutet. Nanopartikel aggregieren in fraktalen Clustern, die bei geringer Normallast dem Haufwerk eine fraktale Substruktur verleihen [125, 24]. Dies konnte in Simulationen bestätigt werden [126, 19]. Aber auch unabhängig von der Präparation kann durch zyklische Fragmentation und Reagglomeration eine fraktale Substruktur entstehen [25, 123]. Durch Verwendung einer fraktalen Anfangskonfiguration soll überprüft werden, ob in diesem Modell eine fraktale Substruktur der mechanischen Belastung standhält und die fraktale Dimension durch die Präparation vorgegeben wird. Des Weiteren sollte eine Anfangskonfiguration nicht überverfestigt [75] und isotrop [126–128] sein, also keine bevorzugte Kontakttrichtung aufweisen.

Hier wird ein geometrischer Algorithmus vorgestellt, mit dem hochporöse, fraktale und isotrope Konfiguration mit vorgegebenem Volumenanteil erzeugt werden können. Der Algorithmus ähnelt der Cluster-Cluster-Aggregation [129]: In einer vollperiodischen Zelle der Maße $L_x \times L_y (\times L_z)$ in 2D (3D), werden N Partikel überlappfrei platziert, welche initiale Cluster der Größe Eins definieren. Diese werden nun sukzessiv zu einem Cluster zusammengefügt, indem nächste Nachbarpartikel über eine ballistische Trajektorie verbunden werden. Dabei werden die Cluster nicht rotiert. Im Falle ungleich großer Cluster wird der mit der geringeren Masse bewegt. Dieser Aggregationsprozess endet nach $N - 1$ Verbindungsschritten ($Z \approx 2$).

Die fraktale Dimension der so generierten Konfigurationen kann mit Hilfe der Dichtekorrelationsfunktion, Gl. (2.23), bestimmt werden. Dabei berücksichtigen wir keine Richtungsabhängigkeit und beschränken uns auf Kreise (bzw. Kugeln). Für Fraktale gilt $DK(r) \propto r^{d_f - D}$ [130].

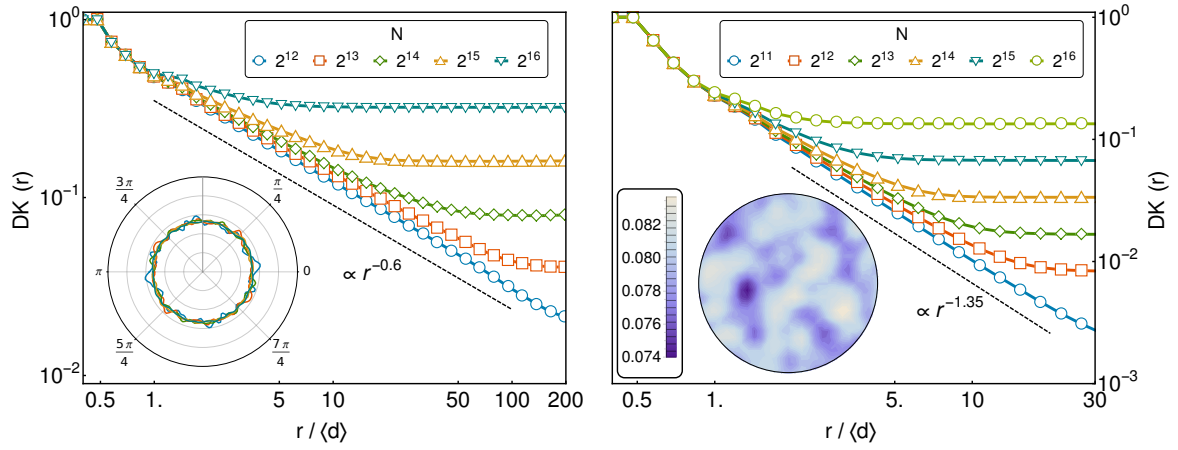


Abbildung 3.1.: Dichtekorrelation hochporöser Packungen in 2D (links) und 3D (rechts) für verschiedene Partikelanzahlen bei fester Simulationszellengröße. Die Insets zeigen die WDV der Kontaktorientierungen als Polardiagramm für die dargestellten Konfigurationen in 2D und als flächentreue Projektion der unteren Einheitskugel für $N = 2^{13}$ in 3D.

Abb. 3.1 zeigt die Dichte-Korrelationsfunktion für zwei- (links) und dreidimensionale (rechts) monodisperse Konfigurationen unterschiedlicher Packungsdichte. Dazu wurde bei fester Systemgröße $L_x = L_y = 400$ in 2D ($L_x = L_y = L_z = 80$ in 3D) die Anzahl der Partikel variiert. Grob können drei Regime identifiziert werden: Das Nahfeld $r \leq 1$ ist durch die Kontaktverteilung bestimmt, alle Kurven überlappen. Im Bereich $r > 1$ folgt die Dichte-Korrelationsfunktion einem Potenzgesetz bis zu einem $\nu(N)$ -abhängigen Übergangspunkt, ab welchem das Regime konstanter Packungsdichte erreicht ist. Der Grenzfall hochporöser Systeme ermöglicht die eindeutige Bestimmung einer fraktalen Dimension: $d_f^{(2D)} \approx 1.4$ und $d_f^{(3D)} \approx 1.65$. In beiden Fällen ist d_f kleiner als die Dimension ballistischer Cluster-Cluster-Aggregate ($d_f^{(2D)} \approx 1.55$ und $d_f^{(3D)} \approx 1.98$) [131]. Die Isotropie der erzeugten Konfigurationen veranschaulicht die Kontaktverteilung (Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Kontaktorientierungen) in den Insets der Graphen. Die Fluktuationen der WDV hängen dabei von der Partikelanzahl ab und gehen (quantifiziert als Varianz, oder als Peak-to-Valley-Ratio) mit steigendem N gegen Null (nicht dargestellt). Alternativ kann die Anisotropie auch mit Hilfe des deviatorischen Anteils des Fabric-Tensors zweiter Stufe quantifiziert werden. Wie in [122] gezeigt, geht auch diese Messgröße mit steigender Partikelanzahl gegen Null.

Dieser Algorithmus ist nicht auf monodisperse Packungen beschränkt und erzeugt hochporöse Konfigurationen mit fraktaler Substruktur, die in dieser Arbeit als Anfangskonfigurationen verwendet werden. Falls nicht anders spezifiziert, werden dazu Konfigurationen mit einer Packungsdichte von $\nu \approx 0.2$ verwendet. Um einen verlustfreien Import zu gewährleisten, wird ein minimaler Überlapp von $\delta r \approx 10^{-12} d$ erzwungen und das System in einer Relaxationsphase mit Hilfe einer schwachen viskosen Hintergrundreibung $\gamma_{\text{vis}} \approx 10^{-2} \sqrt{2 k_n m}$ ins Gleichgewicht gebracht. Dabei bezeichnet k_n die Partikelsteifigkeit. Inwiefern die so erzeugten Konfigurationen unter mechanischer Belastung stabil sind, wird Kapitel 4.5 offenbaren.

KAPITEL 4

Homogener Fluss

Wir betrachten ein einfaches System, um die Rheologie zeitverfestigender granularer Materie zu studieren: die planare Scherung in 2D. Die Interaktion des Haufwerks mit Wänden ist komplex: unvollständiger Scherübertrag an glatten Wänden [45], Layering [71, 46] sowie langreichweitiger Einfluss von rauen Wänden [132]. Um solche, gerade bei kleinen Systemen, störenden Effekte zu umgehen, werden Lees-Edwards-Randbedingungen verwendet. Ähnlich dem stationärem Fließen auf einer schiefen Ebene weit entfernt vom Boden [133] ist homogener Fluss zu erwarten [134]. Quasistatische Scherung zeichnet sich jedoch durch ein nicht-affines Deformationsfeld [135] und Scherlokalisierung [81, 136, 46] aus. Ist die Scherung wirklich homogen? Wie äußern sich diese Eigenschaften bei Scherung mit Lees-Edwards-Randbedingungen? Ist eine charakteristische Länge, ähnlich der Scherbandbreite, messbar? Diese Fragen werden in Abs. 4.3 - 4.5 untersucht. Darüber hinaus wird in Abs. 4.5 überprüft, inwiefern Adhäsionskräfte diese charakteristische Länge beeinflussen und ob eine weitere charakteristische Länge, z.B. eine adhäsionsbedingte Clustergröße [64], messbar ist. Ferner wird der Einfluss von Reibung und zeitunabhängigen Adhäsionskräften auf das Fließverhalten untersucht. Beide Parameter bestimmen die Festigkeit des Schüttguts und sind somit von zentraler Bedeutung für zeitverfestigende granulare Materie. Der zentralen Frage, welchen Einfluss zeitabhängige Adhäsionskräfte auf das Fließverhalten granularer Materie haben, widmet sich Abs. 4.6. Aufgrund des Umfangs der Studie wird eine kurze Einführung in die Problematik inkl. der relevanten Literatur am Anfang und eine kleine Zusammenfassung der Ergebnisse am Ende jedes Unterabschnitts gegeben. Zunächst wird in Abs. 4.1.1 - 4.2 das Kontaktmodell, die Deformationssteuerung sowie die Parameterwahl vorgestellt.

4.1. Modell und Simulationmethode

4.1.1. Kontaktmodell

Betrachten man reibungsfreie Partikel mit gleichen elastischen Eigenschaften ist die Tangentialkraft Null und die Wechselwirkung allein durch die Normalkraft gegeben. Diese muss für die hier durchgeführte Studie folgenden Anforderungen gerecht werden: eine elastische Rückstellkraft beinhalten, welche dem Partikelüberlapp entgegen wirkt, einen Dissipationsmechanismus aufweisen, um Energie aus dem System abzuführen und eine Adhäsionskraft beinhalten, um kohäsive Schüttgüter zu beschreiben. Mit der Symmetrieachse parallel zueinander ausgerichtete elastische Zylinder sind das dreidimensionale Pendant zu diesem zweidimensionalen System. Die Kontaktmechanik dieser Zylinder entspricht dem Grenzfall des Hertz'schen Kontaktproblems [90], bei welchem eine der Halbachsen der i.A. elliptischen Kontaktfläche gegen unendlich strebt. Unter der Annahme, dass die Kontaktfläche klein im Vergleich zum Radius der Zylinder ist, steigt die elastische Rückstellkraft linear mit der Eindringtiefe [137]. Motiviert durch dieses Ergebnis soll das um Adhäsionskräfte erweiterte lineare Feder-Dämpfer-Modell

$$F_n(\xi, \dot{\xi}, t_k) = \underline{F}_{ij} \cdot \underline{n}_{ij} = \max \left\{ k_n \xi + \alpha_n \sqrt{k_n m_{\text{eff}}} \dot{\xi}, -F_{\text{adh}}(t_k) \right\}, \quad (4.1)$$

(im Folgenden kurz LFD-Modell) die Normalkraft bestimmen. Dabei beschreibt $\xi = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - |\underline{r}_{ij}|$ den Überlapp der Partikel, k_n die Steifigkeit, m_{eff} die reduzierte Masse, α_n einen dimensionslosen Dämpfungskoeffizienten und $F_{\text{adh}}(t_k)$ die kontaktzeitabhängige Adhäsionskraft. Die Wechselwirkung (und damit Kontaktzeit) zwischen zwei Partikeln beginnt mit Berührung ($\xi \geq 0$) und endet, sobald $F_n \leq -F_{\text{adh}}(t_k)$. Bei Kontaktverlust wird $t_k = 0$ gesetzt und es gilt $F_{\text{adh}}(0) = 0$. Es gilt $t_k \geq 0$. In Abb. 4.1 sind zwei Kollisionsverläufe gemäß dieses Kontaktmodells für unterschiedliche Relativgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von ξ dargestellt. Dabei vernachlässigen wir zunächst die Zeitabhängigkeit von F_{adh} . Im Fall der roten Kurve ist die Relativgeschwindigkeit groß genug um die Adhäsionskraft zu überwinden. Der Kontakt endet, sobald $k_n \xi + \alpha_n \sqrt{k_n m_{\text{eff}}} \dot{\xi} = -F_{\text{adh}}(t_k)$ gilt. Weitere Trennung der Partikel erfolgt mit $F_n = 0$. Die schwarze Kurve skizziert einen Fall, bei welchem die Partikel aneinander haften bleiben. Die Gleichgewichtsposition entspricht $\xi = 0$. Die Beschränkung $F_n \geq -F_{\text{adh}}$ unterbindet „künstliche Adhäsion“, d.h. $F_n < 0$ im Fall $F_{\text{adh}} = 0$. Dieses Artefakt des LFD-Modells tritt auf, wenn $\xi > 0$ als Kontaktkriterium angenommen wird und der viskose Term bei Trennung der Partikel eine Anziehungskraft ($F_n < 0$) verursacht. Im Experiment würden sich die Partikel in diesem Fall schneller voneinander wegbewegen als in ihrer Form relaxieren. Die künstliche Adhäsionskraft wird somit durch ein nicht sorgsam gewähltes Kontaktabbruchkriterium verursacht und ist unphysikalisch (siehe hierzu auch [92, 138]).

Die Adhäsionskraft zwischen den Partikeln soll mit der Kontaktzeit gegen einen festen Grenzwert wachsen. Hierzu benutzten wir den phänomenologischen Ansatz

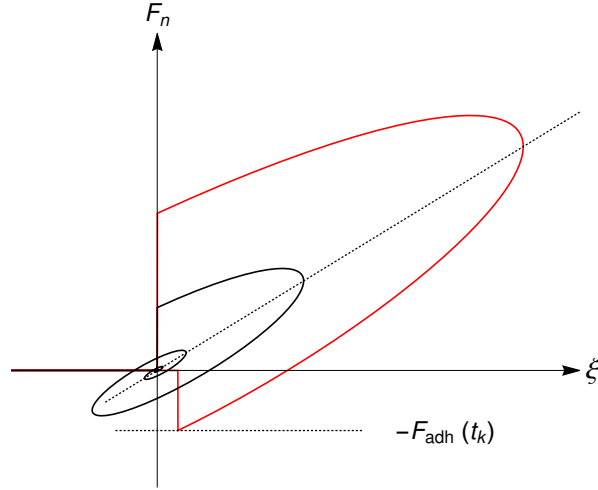


Abbildung 4.1.: Normalkraft des verwendeten Kontaktmodells in Abhängigkeit des Überlapps für zwei verschiedene Kollisionen mit unterschiedlicher Relativgeschwindigkeit.

$$F_{\text{adh}}(t_k) = F_{\text{adh}}^{(\text{max})} \frac{4 r_{\text{eff}}}{\langle d \rangle} \left(1 - e^{-\frac{t_k}{t_c}} \right) , \quad (4.2)$$

mit der charakteristischen Verfestigungszeit t_c , der maximalen Adhäsionskraft $F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$, dem reduzierten Radius $r_{\text{eff}} = \frac{1}{2} d_i d_j / (d_i + d_j)$ und dem mittleren Durchmesser $\langle d \rangle$. Neben der Zeitabhängigkeit weist Gleichung (4.2) auch eine Partikelgrößenabhängigkeit auf, ähnlich der van-der-Waals-Kraft [139, 140, 105]. Es soll jedoch keine breite Partikelgrößenverteilung benutzt werden, sodass kein großer Einfluss zu erwarten ist. Auch wenn Gleichung (4.2) die Zeitverfestigung einiger Schüttgüter richtig beschreibt [141, 33, 35], ist dieser Ansatz etwas allgemeiner und materialübergreifend zu interpretieren. Gleichung (4.2) definiert in Abhängigkeit von t_c den *adhäsions-* ($t_c \rightarrow 0$) und den *zementierungsbestimmen* Grenzfall ($t_c \rightarrow \infty$). Im ersten Grenzfall wirkt unmittelbar nach Kontaktbeginn die maximale Adhäsionskraft, sodass $F_{\text{adh}} \approx \text{konstant}$ ist und keine Zeitverfestigung berücksichtigt werden muss. Im zementierungsbestimmten Grenzfall stellt sich während der gesamten Kontaktzeit keine signifikante Anziehungskraft zwischen den Partikeln ein, sodass das Verhalten des Schüttguts stark von der Präparation der Kontakte abhängt.

Die korrekte Berechnung der Partikeltrajektorien erfordert die richtige Wahl des Zeitschritts in den Simulationen. Als mechanisch kürzeste Zeiteinheit ist die Kollisionsdauer für die Festlegung des Zeitschritts relevant. Im Folgenden sollen deshalb die Kollisionszeiten des LFD-Modells diskutiert werden, zunächst ohne Adhäsionskraft. Wie bereits erwähnt ist das einfachste Kontaktkriterium $\xi > 0$. In diesem Fall entspricht die Kollisionszeit gerade der halben Schwingungsperiode

$$t_{\text{Koll}}^{(\xi > 0)} = \frac{\pi}{\omega_0 \sqrt{1 - \frac{\alpha_n^2}{4}}} , \quad (4.3)$$

wobei $\omega_0 = \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$ die Oszillationsfrequenz des ungedämpften harmonischen Oszillators beschreibt und der Dämpfungskoeffizient auf das Intervall $0 \leq \alpha_n < 2$ beschränkt sein soll. Dämpfung verlängert die Kollisionsdauer, sodass $t_{\text{Koll}}^{(\xi>0)}(\alpha_n = 0)$ eine untere Schranke definiert. Fordert man hingegen $F_n > 0$, so endet die Kollision sobald $F_n(t_{\text{Koll}}^{(F>0)}) = 0$ erreicht ist, mit

$$t_{\text{Koll}}^{(F>0)} = \frac{\arctan\left(\frac{2}{\alpha_n} \sqrt{1 - \frac{\alpha_n^2}{4}}\right)}{\omega_0/2 \sqrt{1 - \frac{\alpha_n^2}{4}}} . \quad (4.4)$$

Gleichungen (4.3) und (4.4) zeigen, dass die Kollisionszeit für beide Abbruchbedingungen zwar vom Dämpfungskoeffizienten, jedoch nicht von der Relativgeschwindigkeit der Partikel abhängt, anders als beim Hertz'schen Kontaktmodell für Kugeln in 3D [138]. Dies ändert sich, sobald eine Adhäsionskraft F_{adh} berücksichtigt wird. Dabei kann nur der adhäsionsbestimmte Grenzfall ($F_{\text{adh}} = F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$) analytisch gelöst werden. Der Kontakt bricht, sobald die Normalkraft $-F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$ gleicht. Das theoretische Minimum der Kontaktkraft in einem LFD-Modell ($\partial_t F_n = 0$, $\partial_t^2 F_n > 0$) wird zum Zeitpunkt

$$t_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})} = \begin{cases} \frac{\arctan\left(\frac{(\alpha_n+1)\sqrt{4-\alpha_n^2}}{\alpha_n^2+\alpha_n-2}\right) + \pi}{\omega_0/2 \sqrt{1-\frac{\alpha_n^2}{4}}} & 0 \leq \alpha_n < 1 \\ \frac{2\pi\sqrt{3}}{3\omega_0} & \alpha_n = 1 \\ \frac{\arctan\left(\frac{(\alpha_n+1)\sqrt{4-\alpha_n^2}}{\alpha_n^2+\alpha_n-2}\right)}{\omega_0/2 \sqrt{1-\frac{\alpha_n^2}{4}}} & 1 < \alpha_n < 2 \end{cases} , \quad (4.5)$$

während der Kollision erreicht. Der Betrag der minimalen Kraft wächst dabei linear mit der Kollisionsgeschwindigkeit v_{Koll} . Gilt

$$v_{\text{Koll}} < v_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})} \\ = \frac{e^{\frac{1}{2}\alpha_n\omega_0 t_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})}} F_{\text{adh}}^{(\text{max})} \sqrt{4-\alpha_n^2}}{m_{\text{eff}} \omega_0 \left((\alpha_n^2 - 2) \sin\left(\tilde{\omega} t_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})}\right) - \alpha_n \sqrt{4-\alpha_n^2} \cos\left(\tilde{\omega} t_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})}\right) \right)} , \quad (4.6)$$

mit $\tilde{\omega} = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{\alpha_n^2}{4}}$, wird die Adhäsionsbarriere nicht überwunden und der Kontakt bleibt erhalten (siehe schwarze Kurve im rechten Graph von Abb. 4.1). Übersteigt die Relativgeschwindigkeit $v_{\text{Koll}}^{(F>-F_{\text{adh}}^{(\text{max})})}$, bricht der Kontakt. Auch wenn sich keine analytische Lösung der Kollisionszeit für den allgemeinen Fall zeitabhängiger Adhäsionskräfte

angeben lässt, reicht die Lösung der Grenzfälle (Gl. (4.4)) und (4.5) aus, um die kürzeste Zeitskala des Systems abzuschätzen und damit den Zeitschritt festzulegen.

Reale Partikel besitzen eine Oberflächenrauigkeit, welche den Übertrag von Scherkräften an der Kontaktfläche ermöglicht. Um den schiefen Stoß zweier Partikel korrekt zu beschreiben, muss neben der Normalkraft auch die tangentielle Elastizität des Kontaktes, Gleitreibung sowie Partikelrotation berücksichtigt werden. Die allgemeine Lösung des Kontaktproblems ist, in Abhängigkeit von den gegebenen Randbedingungen, sehr komplex [90]. So stellt sich z.B. heraus, dass die Tangentialspannung im Kontakt sphärischer Partikel (auch Zylinder) am Kontaktrand divergiert, während die Normalspannung am Kontaktrand auf Null abfällt. Eine Haftbedingung, welche das Verhältnis der Spannungen durch den Haftreibungskoeffizienten beschränkt [142], ist am Kontaktrand stets verletzt. Bedient man sich dennoch der Näherung, dass die Kontaktfläche komplett haftet, steigt analog zur Normalkraft die tangentielle elastische Rückstellkraft linear mit der tangentialen Verschiebung [143]. Diese lässt sich nicht aus aktuellen Relativposition bestimmen, sondern ergibt sich aus der Vorbelastung des Kontaktes, d.h. der Kontaktvorgeschichte. Erschwerend kommt hinzu, dass zyklische Be- und Entlastung des Kontaktes (in Tangential- und Normalrichtung) das Kontaktverhalten durch Oberflächenabnutzung [144] ändern. Eine korrekte Beschreibung dieses Effekts ist jedoch nicht Anspruch dieser Studie. Die korrekte Speicherung der Tangentialverschiebung ist hingegen essentiell für jedes Tangentialkraftmodell. Missachtung dieser Forderung kann zu Energieerzeugung am Kontakt führen [145]. Mit der Komplexität des Kontaktproblems steigt auch die Vielfalt an möglichen Implementierungen der Tangentialkraft [97, 93, 96, 146]. Der Vergleich mit experimentellen Arbeiten [147, 148] zeigt jedoch, dass die Verwendung eines LFD-Modells in tangentialer Richtung unter Berücksichtigung von Gleitreibung das Stoßverhalten zweier (nicht adhäsiver) Partikel qualitativ richtig beschreibt [146]. Diese Arbeit motiviert folgenden Ansatz für die Tangentialkraft:

$$\underline{F}_t(\underline{\zeta}, \dot{\underline{\zeta}}) = - \min \left\{ |k_t \underline{\zeta} + \alpha_t \sqrt{k_t m_{\text{eff}}} \dot{\underline{\zeta}}|, \mu |F_n + F_{\text{adh}}| \right\} \dot{\underline{\zeta}} / |\dot{\underline{\zeta}}|, \quad (4.7)$$

mit der Gleitgeschwindigkeit

$$\dot{\underline{\zeta}} = \dot{\underline{r}}_{ij} - (\dot{\underline{r}}_{ij} \cdot \underline{n}_{ij}) \underline{n}_{ij} - \underline{n}_{ij} \times \left(\frac{d_i}{2} \underline{\omega}_i + \frac{d_j}{2} \underline{\omega}_j \right), \quad (4.8)$$

die sich aus dem Tangentialanteil der relativen Translationsgeschwindigkeit und der Partikelrotation (Winkelgeschwindigkeiten $\underline{\omega}_i, \underline{\omega}_j$) zusammensetzt. Es gilt *actio = reactio*, d.h. Partikel j erfährt die Tangentialkraft $-\underline{F}_t$. Die Tangentialverschiebung der Partikel erhält man durch Integration der Gleitgeschwindigkeit

$$\underline{\zeta} = \int_0^{t_k} \dot{\underline{\zeta}}(t') dt' \quad (4.9)$$

und sie fungiert somit als eine Feder in der Tangentialebene, welche als kontaktspezifische Information gespeichert werden muss. Zu jedem Zeitpunkt der Simulation muss $\underline{\zeta} \perp \underline{n}_{ij}$ gewährleistet sein, damit die Tangentialkraft keinen Beitrag zur Normalkraft leistet. Da \underline{n}_{ij} mit laufender Dynamik die Richtung ändern kann, muss $\underline{\zeta}$ in jedem Zeitschritt in die Tangentialebene projiziert bzw. rotiert werden [100]. Der Betrag der Tangentialkraft wird durch die Coulombschwelle $\mu |F_n + F_{adh}|$ mit dem Reibungskoeffizienten μ begrenzt. Es wird das selbe μ für Haftreibung sowie Gleitreibung verwendet. Sollte die Federkraft die Coulombschwelle überschreiten, muss die Federlänge angepasst werden, damit keine Energie erzeugt wird, d.h. Gl. (4.9) gilt nicht streng, siehe [149].

Die Einführung einer Tangentialfeder wird durch eine weitere Zeitskala, deren Schwingungsdauer, begleitet. Diese ist in Analogie zu Normalkraft (Gl. (4.3)) durch die Steifigkeit k_t festgelegt. Mindlin berechnete unter der Annahme einer komplett haftenden Kontaktfläche den Zusammenhang zwischen k_n und k_t für eine elliptische Kontaktfläche [143] und zeigte, dass das Verhältnis der beiden i.A. von der Poissonzahl \mathcal{N} abhängt. Im Grenzfall des „Streifenkontaktes“ (Zylinder) gilt jedoch $k_n = k_t$ (für Kugeln gilt $k_t/k_n = 2(1 - \mathcal{N}) / (2 - \mathcal{N})$, d.h. $2/3 < k_t/k_n < 1$ für übliche Materialien [90]). Ein einfaches und instruktives Rechenbeispiel zum Verhältnis der beiden Steifigkeiten liefert Walton [89], indem er den schrägen Aufprall eines elastischen Partikels an einer Wand unter Berücksichtigung der Partikelrotation betrachtet. Dabei verwendet er lineare Federn für die Wechselwirkung in Normal- und Tangentialrichtung mit den Steifigkeiten k_n bzw. k_t . Die Forderung gleicher Schwingungsdauer dieser beiden Federn während der Kollision ergibt

$$k_t = k_n \left(1 + \frac{m d^2}{4 I_o} \right)^{-1}, \quad (4.10)$$

wobei I_o das Trägheitsmoment des Partikels beschreibt. Für eine Scheibe gilt demnach $k_t/k_n = 1/3$ (für eine Kugel $2/7$). Sowohl die Abschätzung durch Walton, als auch die auf Elastizitätstheorie basierende Berechnung durch Mindlin zeigen, dass die Steifigkeiten die gleiche Größenordnung besitzen. Auch wenn das genaue Ergebnis des schrägen Stoßes vom Verhältnis k_t/k_n abhängt, ist das qualitative Verhalten unabhängig vom Verhältnis, solange die beiden Steifigkeiten eine vergleichbare Größenordnung besitzen [146]. Die Tangentialkraft aus Gl. (4.7) verursacht das Drehmoment

$$\frac{M_i^{(\text{gleit})}}{d_i} = -\frac{1}{2} \underline{n}_{ij} \times \underline{F}_t = \frac{M_j^{(\text{gleit})}}{d_j}, \quad (4.11)$$

welches in gleicher Richtung auf die beide Kontaktpartner wirkt. Der Hebelarm ist durch den jeweiligen Partikelradius gegeben. Betrachtet man Tangentialkräfte und Drehmomente gemeinsam, ist der Gesamtdrehimpuls um den Schwerpunkt der beiden Kontaktpartner erhalten [100].

Neben Coulomb'scher Reibung berücksichtigen wir auch Rollreibung, welche Partikelketten, also Strukturen mit einer Koordinationszahl ≈ 2 , innerhalb des Schüttguts

stabilisiert [150, 18]. Rollreibung hat bei kohäsiven Haufwerken kritischen Einfluss auf die Packungsdichte [151] und ermöglicht die Stabilisierung fraktaler Substrukturen und hoch poröser Materialien [152, 126, 19]. Physikalisch kann Rollreibung durch Viskosität oder Plastizität der Partikel [153, 103, 154], ein hystereseartiges Adhäsionsmodell [155], oder Oberflächenverschmutzung motiviert werden. Während Partikel mit der Geschwindigkeit

$$\dot{\underline{\chi}} = r_{\text{eff}} \underline{n}_{ij} \times (\underline{\omega}_j - \underline{\omega}_i) \quad (4.12)$$

übereinander abrollen, entsteht in Rollrichtung ($\propto \dot{\underline{\chi}}$) neue Kontaktfläche, während sich in entgegengesetzter Richtung die Partikeloberflächen voneinander trennen. Bei diesem Prozess können drei der genannten Mechanismen zu Energieverlust führen und ein Kontaktdrehmoment erzeugen. Häufig wird Rollreibung jedoch auch verwendet, um nicht-sphärische Partikel in Simulationen mit Kugeln darstellen [156, 157]. Für diese Studie soll der genaue Ursprung der Rollreibung nicht weiter spezifiziert, sondern das phänomenologische Modell von Luding [100] benutzt werden. Dabei wirkt Rollreibung ausschließlich als Drehmoment, welches das Abrollen der Partikel übereinander unterbindet, solange ein kritisches Drehmoment nicht überschritten wird. Ähnlich der Haftreibung ist dieses kritische Drehmoment eine Funktion der Normal- und Adhäsionskraft und wirkt der Rollbewegung bei größeren externen Drehmomenten entgegen. Zur Implementierung verwendet Luding eine Feder, welche (ähnlich der Tangentialfeder) durch die Relativgeschwindigkeit am Kontakt gespannt wird und die Kraft

$$\underline{F}_{\text{roll}} = -\min \left\{ |k_r \underline{\chi} + \gamma_r \dot{\underline{\chi}}|, \mu_r |F_n + F_{\text{adh}}| \right\} \dot{\underline{\chi}} / |\dot{\underline{\chi}}| \quad (4.13)$$

bestimmt, wobei die Rollgeschwindigkeit $\dot{\underline{\chi}}$ (Gl. (4.12)) verwendet wird, um die Feder auszulenken, d.h.

$$\underline{\chi} = \int_0^{t_k} \dot{\underline{\chi}}(t') dt' \quad . \quad (4.14)$$

Diese Feder liegt ebenfalls in der Tangentialebene und muss in jedem Zeitschritt entsprechend zurückrotiert/-projiziert werden. Die Verwendung der Federkraft $\underline{F}_{\text{roll}}$ ermöglicht den direkten Vergleich mit der Normalkraft und einen dimensionslosen Rollreibungskoeffizient, hat jedoch keine direkte physikalische Bedeutung. Die Kontaktpartner erfahren das Drehmoment

$$\underline{M}_i^{(\text{roll})} = r_{\text{eff}} \underline{n}_{ij} \times \underline{F}_{\text{roll}} = -\underline{M}_j^{(\text{roll})} \quad , \quad (4.15)$$

welches betraglich gleich aber entgegengesetzt ist. Der reduzierte Radius r_{eff} ist die charakteristische Länge, welche $\underline{F}_{\text{roll}}$ in ein Drehmoment übersetzt. Es ergibt sich ein

„konventioneller“ Rollreibungskoeffizient aus dem Produkt $\mu_r r_{\text{eff}}$. Die Verwendung einer weiteren Feder zur Modellierung der Rollreibung wird durch eine weitere Schwingungsdauer begleitet. Die Federsteifigkeit k_r hat im Gegensatz zur Tangentialsteifigkeit jedoch keinen direkten physikalischen Ursprung.

4.1.2. Kompression mit periodischen Randbedingungen

Methoden zur Durchführung von Simulationen mit periodischen Randbedingungen unter festgehaltenem Druck wurden bereits in die Molekulardynamik entwickelt (siehe [109] für eine Übersicht). Diese basieren auf einem Übergang zu der dem Druck konjugierten Variable Volumen. Durch eine veränderliche Simulationszellenhöhe kann z.B. eine gewünschte Normalspannung eingestellt werden. Zur Dynamik der Simulationszellenhöhe gibt es unterschiedliche Ansätze. In Anlehnung an Anderson [158] sowie Parinello und Rahman [159] kann die Beschleunigung proportional zur Differenz aus Solldruck und aktuellem Druck gesetzt werden [126, 160]. Dies bedingt die Einführung einer „virtuellen“ Masse, welche die Trägheit der Volumenänderung beeinflusst.

Die Schersimulationen in dieser Arbeit werden größtenteils quasistatisch durchgeführt, sodass Trägheitskräfte vernachlässigbar sind. Deshalb wird die Deformationsrate der Scherzellenhöhe durch

$$\dot{\epsilon}_{yy}(\sigma_{yy}) = \dot{\epsilon}_0 \frac{(\sigma_{yy} - P)}{P} \quad (4.16)$$

geregelt, d.h. die Druckdifferenz zwischen Solldruck P und σ_{yy} (Abb. 4.2, links). Die Regelungskonstante $\dot{\epsilon}_0$ muss passend gewählt werden, damit eine konstante Normalspannung während der quasistatischen Deformation mit Scherrate $\dot{\gamma}$ gewährleistet ist. Diese Regelung entspricht qualitativ einer Wand, welche viskoser Reibung unterliegt und quasistatisch mit einem definierten Druck angetrieben wird. Der Ansatz die Deformationsrate direkt proportional zum Druck zu setzen, wurde im Kontext granularer Materie von Campbell [161] eingeführt und findet seither vielfach Anwendung [64, 162, 79, 121].

Zusätzlich zur Scherzellenhöhe wird gelegentlich auch die Position einzelner Partikel reskaliert. Da die quasistatische Deformation granularer Materie in hohem Maße nicht-affin ist [135], wird in dieser Arbeit darauf verzichtet, die Partikelpositionen direkt zu verändern.

4.1.3. Lees-Edwards-Randbedingungen

Die Scherung des zweidimensionalen Systems mit periodischen Randbedingungen wird über die Fortsetzungen des Systems senkrecht zur Scherrichtung induziert (Abb. 4.2, rechts). Die dabei verwendete Geschwindigkeit entspricht der vorgegebenen Scherrate

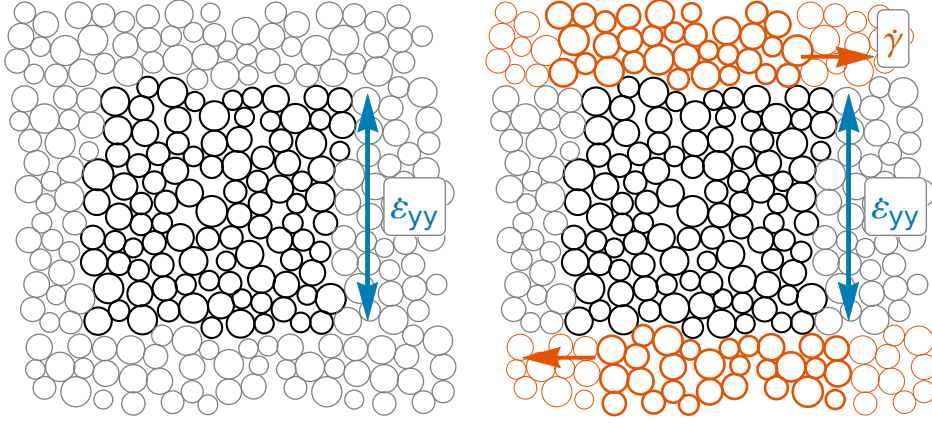


Abbildung 4.2.: Beispielkonfiguration während der Scherung. Periodische Fortsetzungen des Systems sind grau, aktiv bewegte Fortsetzungen orange-rot dargestellt.

$\dot{\gamma}$, sodass Position und Geschwindigkeit der Partikel in den betroffenen Fortsetzungen (mit \star gekennzeichnet) durch

$$\underline{r}_i^\star(t) = \underline{r}_i \pm \begin{pmatrix} \text{Mod}(\dot{\gamma} t L_y, L_x) \\ L_y \end{pmatrix} \quad \underline{v}_i^\star = \underline{v}_i \pm \dot{\gamma} L_y \underline{e}_x \quad . \quad (4.17)$$

beschrieben werden können, wobei der Modulooperator $\text{Mod}(\dot{\gamma} t L_y, L_x)$ den Rest der Division mit Dividend $\dot{\gamma} t L_y$ und Divisor L_x angibt. Diese Modifikation ist nicht nur für die Wechselwirkung der Partikel an den Rändern der Simulationszelle relevant, sondern wird auch berücksichtigt, wenn ein Partikel die Scherzelle senkrecht zur Scherrichtung verlässt und an der gegenüberliegenden Seite wieder eintritt. Der Randübergang in y -Richtung bedingt einen Geschwindigkeitszuwachs um $\pm \dot{\gamma} L_y \underline{e}_x$ sowie eine zeitabhängige Verschiebung in Scherrichtung um $\text{Mod}(\dot{\gamma} L_y t, L_x)$.

Diese Randbedingungen sind unter dem Namen Lees-Edwards-Randbedingungen (A.W. Lees und S.F. Edwards [16]) bekannt und stellen ein wichtiges Werkzeug im Bereiche der simulationsgestützten Forschung dar [109], das bis heute Anwendung findet [163, 164, 161, 165, 162, 166]). Abhängig von der Problemstellung wird häufig jedoch der *slldod*-Algorithmus genannt, eine Erweiterung der Lees-Edwards-Randbedingungen für eine Scherung mit zeitabhängiger Scherrate die auf nicht-newtonscher Mechanik basiert [167]. Die Modifikation der Bewegungsgleichungen im *slldod*-Algorithmus reduziert sich im Grenzfall konstanter Scherrate zu einer Delta-Inhomogenität für den Zeitpunkt $t = 0$ (Beginn der Scherung) [109]. Dies entspricht der Initialisierung des Systems mit einem linearen Geschwindigkeitsprofil. Für alle späteren Zeitpunkte gelten die unveränderten newtonschen Bewegungsgleichungen in Kombination mit den Lees-Edwards-Randbedingungen aus Gleichung (4.17).

Die Kombination aus Drucksteuerung und Lees-Edwards-Randbedingungen induziert eine Deformation des Systems, die sich mit folgendem Geschwindigkeitsgradienten beschreiben lässt:

$$\nabla \otimes \underline{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial x} \\ \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \dot{\gamma} & \dot{\epsilon}_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 \\ \dot{\gamma}/2 & \dot{\epsilon}_{yy} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\dot{\gamma}/2 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.18)$$

Diese Matrix gibt die räumliche Änderung des Geschwindigkeitsfeldes an und lässt sich in einen symmetrischen und antisymmetrischen Teil zerlegen. Der antisymmetrische Anteil entspricht einer Rotation und zeigt, dass die planare Scherung mit einer Drehung verbunden ist. Diese Drehung trägt jedoch nicht zur relativen Verschiebung der Partikel innerhalb des Systems bei, weshalb nur der symmetrische Anteil als Deformationsratentensor definiert wird.

Andere Methoden zur Scherung granularer Materie mit periodischen Randbedingungen benutzen eine variable Scherzellengröße in allen Raumrichtungen. So z.B. die volumenhaltende Scherung [168], bei welcher die Raumrichtungen mit einer jeweils konstanten Rate gestaucht bzw. gestreckt werden. In Anlehnung an eine biaxiale Scherung ist es auch möglich, durch eine Kombination aus Drucksteuerung in einer Richtung und Deformationssteuerung in der anderen Richtung eine Scherung zu induzieren [169].

Ähnlich zur Kompression könnte durch direkte Manipulation der Partikelpositionen ein Deformationsfeld vorgegeben werden. Aufgrund der nicht-affinen Bewegung des Partikelkollektivs im quasistatischen Grenzfall [135, 65, 46], wird in dieser Arbeit davon abgesehen, die Partikeltrajektorien direkt zu beeinflussen. Sowohl Kompression als auch Scherung wird über die Ränder induziert.

4.2. Parameterwahl und natürliche Einheiten (in 2D)

Abschnitt 4.1.1 offenbart das generische Problem der DEM mit viskoelastischen Partikeln: Die Anzahl der Parameter ist selbst bei einfachen Kontaktmodellen unhandlich groß. Während sich einige dieser Parameter aus Materialeigenschaften ableiten lassen, haben andere, wie z.B. die Steifigkeit der Feder für Rollreibung, keine direkte physikalische Bedeutung. Sollen auch Wände oder mehrere Partikelsorten berücksichtigt werden, müssen zusätzliche Material- und Steuerungsparameter bestimmt werden. Auch in Simulationen mit periodischen Randbedingungen sind Steuerungsparameter ($\dot{\epsilon}_0$ und $\dot{\gamma}$) zu bestimmen. Um sich nicht auf ein konkretes Parameterensemble zu beschränken und materialübergreifende Aussagen zu treffen, ist die Einführung von dimensionslosen Größen (ähnlich der Reynoldszahl) ratsam. Diese Größen werden im Folgenden identifiziert und auf deren Basis die Parameterwahl erläutert.

Als natürliche Einheiten für alle Simulationen in diesem Kapitel werden der angelegte Druck P , die Feststoffdichte der Partikel ρ und der Partikeldurchmesser d festgelegt.

P gibt in Kombination mit der Partikelmasse m die Zeitskala $\sqrt{m/P}$ (im Folgenden *Trägheitszeit* genannt) vor, die als charakteristische Zeit der Bewegung eines Partikels

unter Einwirkung von P interpretiert werden kann. Die Masse des Partikels ist durch $m = \rho \pi d^2/4$ gegeben. Diese Trägheitszeit kann mit den Zeitskalen der außen angelegten Deformation, d.h. der Scherrate $\dot{\gamma}$ und der Deformationsrate $\dot{\epsilon}_0$ verglichen werden. Das Produkt aus Trägheitszeit und Scherrate entspricht der Trägheitszahl [15]. Für zweidimensionale Systeme folgt aus Gl. (2.6)

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{P}} \quad . \quad (4.19)$$

Einschlägige Arbeiten [15, 62] erzielten im Bereich $I < 10^{-2}$ scherratenunabhängige Simulationsergebnisse. Ein exakter Schwellwert für den Übergang zu quasistatischer Deformation ist nicht bekannt. Es ist zu erwarten, dass diese Grenze von der Systemgröße abhängt. Eine stringente Definition quasistatischer Deformation wäre die Forderung, dass die inverse Scherrate alle anderen Zeitskalen des Haufwerks übersteigen muss, insbesondere die Relaxationszeiten. In linearer Näherung können Schwingungsmoden sowie Relaxationszeiten der hier untersuchten Packungen berechnet werden (siehe Anhang A.1). Die langsamsten Moden schwingen und relaxieren dabei auf Zeitskalen der Größenordnung $\approx 10 \sqrt{m/P}$, sodass $I(\dot{\gamma}) \leq 10^{-2}$ genug Zeit zur Relaxation lässt. Für alle Simulationen exklusive den Ergebnissen in Abs. 4.3 wurde $I \approx 5 \cdot 10^{-4}$ benutzt und durch Verdoppelung und Halbierung der Scherrate sichergestellt, dass μ_{makro} und ν nicht von $\dot{\gamma}$ abhängen. Bemerkenswert an der Forderung $1/\dot{\gamma} \gg$ alle anderen Zeitskalen des Systems ist, dass im zementierungsbestimmten Grenzfall ($\dot{\gamma} t_c \gg 1$) keine quasistatische Scherung durchgeführt werden kann.

Die Verwendung des Produkts aus Deformationsrate $\dot{\epsilon}_0$ und Trägheitszeit als dimensionslose Kenngröße ist unüblich und offenbart keine notwendige Bedingung für quasistatische Kompression. Dennoch ist ein Vergleich interessant. Fordert man z.B., dass für quasistatische Kompression $\dot{\epsilon}_0 \sqrt{m/P} \ll 1$ gelten muss und identifiziert P mit dem Konsolidierungsdruck einer Packung, ist für hochporöse, fragile Materialien ($P \rightarrow 0$) eine quasistatische Kompression nicht möglich. Auch wenn die mechanischen Aspekte hochporöser Packungen sehr interessant sind und einige offene Fragen bergen [19], beschränken wir uns auf Packungen mit $\nu > 0.1$, wie Abs. 4.5 zeigen wird. Damit der Druck während der Scherung konstant ist und die Drucksteuerung rechtzeitig auf scherinduzierte Schwankungen reagieren kann, sollte $\dot{\epsilon}_0 > \dot{\gamma}$ gelten. Ferner sind Trägheitseffekte zu vermeiden. Als Richtlinie benutzten wir $\dot{\epsilon}_0 \sqrt{m/P} < 1$. Für alle durchgeführten Simulationen wird das feste Verhältnis $\dot{\epsilon}_0/\dot{\gamma} = 20$ gewählt, welches ausreicht, den Druck konstant zu halten (Fluktuationen $\leq 5\%$).

Die Partikelsteifigkeit k_n bestimmt die Kontaktzeit (vgl. Gl. (4.3)) und birgt somit eine weitere Zeitskala, die in Verbindung mit der Scherrate $\dot{\gamma}$ als dimensionslose Größe verwendet werden kann [72, 161]. Möchte man das Kontaktverhalten realer Partikel modellieren, wird k_n durch Young-Modul und Poissonzahl bestimmt. Hier beschränken wir uns nicht auf ein spezifisches Material. Stattdessen wird das Verhältnis aus Steifigkeit und Normalspannung k_n/P als Maß für die Deformation eines Partikels unter Lastdruck P genutzt. Der Partikelüberlapp soll im Vergleich zu allen anderen Längenskalen

der Simulation vernachlässigbar sein, d.h. man strebt den Limes perfekt starrer Partikel an, ähnlich der Kontaktdynamik-Methode [170, 171]. Um einen hinreichend großen Zeitschritt verwenden zu können, wählen wir, motiviert durch [126], $k_n/P = 10^5$. Da somit die kürzeste, noch aufzulösende Zeitskala der Simulationen festgelegt ist, nutzten wir $t_{\text{Koll}}^{\xi>0}/100$ als Zeitschritt in den Simulationen. Wie in Abschnitt 4.1.1 diskutiert, gibt es mehrere Methoden zur Bestimmung der Tangentialsteifigkeit. Zwar bestimmt das Verhältnis k_n/k_t die Poissonzahl der Packung [172], hat jedoch bei plastischen Deformationen keinen Einfluss mehr [72, 15]. Wir wählen den pragmatischen Ansatz $k_n/k_t = 2$, damit die Oszillationsfrequenzen der Federn in gleicher Größenordnung liegen. Ferner setzen wir $k_r = k_t$.

Das Fließverhalten granularer Materie im Regime des dichten Flusses ist unabhängig vom Dämpfungskoeffizienten, sofern der Restitutionskoeffizient nicht zu groß gewählt wird [15]. In einem starren Kontaktnetzwerk steigt die Dissipationsrate mit zunehmendem Dämpfungskoeffizienten (siehe Anhang A.1). Ein großer Dämpfungskoeffizient ist somit einer schnellen Energiedissipation zuträglich. Wie Luding et al. [173] jedoch aufzeigen, kann zu große Dämpfung in einem dynamischen Kontaktnetzwerk die Energiedissipation hemmen. Betrachtet wurde der Stoß einer Partikelkette mit endlichem Abstand zwischen den Partikeln und einer Wand. Wird der Dämpfungskoeffizient und damit die Kontaktzeit zu groß gewählt, kann die Kaskade an Partikelstößen nicht richtig aufgelöst werden und es wird im Vergleich zum Experiment zu wenig Energie dissipiert. Als Kompromiss zwischen diesen beiden Ergebnissen wählen wir einen moderat großen Dämpfungskoeffizienten $\alpha_n = 1$. Im Falle der Tangentialfeder hilft Dämpfung, unphysikalische Schwingungen in der Kontakttangentialebene zu vermeiden [149]. Aus diesem Grund setzten wir $\alpha_t = 2$, d.h. nutzen eine kritisch gedämpfte Feder. Die zur Rollreibung gehörende Feder wird mit $\gamma_r = 2\sqrt{k_r} m_{\text{eff}}$ gedämpft.

Neben dem äußeren Druck P und der Partikelsteifigkeit k_n definiert die Adhäsionskraft durch F_{adh}/d eine charakteristische Spannung des Systems. Der Einfluss der Adhäsionskräfte auf das mechanische Verhalten des Schüttguts unter externer Last kann mit der Kohäsionszahl

$$\eta = \frac{F_{\text{adh}}}{P d} \quad (4.20)$$

abgeschätzt werden [174, 64]. Während sich im Grenzfall $\eta \ll 1$ das Schüttgut fast kohäsionslos verhält, dominiert die Adhäsionskraft der Partikel im Falle $\eta \gg 1$. Der Einfluss von η auf die mechanischen und strukturellen Eigenschaften des Schüttguts unter Scherung ist Gegenstand von Abschnitt 4.5. Im Fall kontaktzeitabhängiger Adhäsionskräfte ist η nicht mehr eindeutig definiert, sodass wir zusätzlich

$$\eta^{(\text{max})} = \frac{F_{\text{adh}}^{(\text{max})}}{P d} \quad (4.21)$$

definieren.

Tabelle 4.1.: Überblick zur Parameterwahl. Parameter, welche im Rahmen dieser Studie variiert werden, referenzieren in Klammern die Abschnittsnummer.

$\dot{\gamma}$	$\dot{\varepsilon}_0$	k_n/P	α_n	$F_{\text{adh}}^{(\text{max})}$	t_c	$k_t; k_r$	α_t	$\mu; \mu_r$	γ_r
(s. 4.3)	$20 \dot{\gamma}$	10^5	1	(s. 4.5)	(s. 4.6)	$k_n/2$	2	(s. 4.4)	$2\sqrt{k_r m_{\text{eff}}}$

Tabelle 4.1 liefert einen Überblick der gewählten Parameter, wobei solche, die im Rahmen dieser Studie variiert werden, in Klammern den entsprechenden Abschnitt referenzieren. Neben den vom Kontaktmodell benutzen mikroskopischen Parametern und den makroskopischen Parametern der Deformationssteuerung ist die Partikelgrößenverteilung ein essentielles Merkmal granularer Packungen. Obwohl sie durchaus Einfluss auf das Verhalten granularer Systeme hat [175] (gerade für kohäsive Systeme [176]), steht dieser Aspekt hier nicht im Fokus. Kristallisationseffekte sollen durch eine moderate Breite der Partikelgrößenverteilung vermieden werden. Dazu wählen wir Partikeldurchmesser gleichverteilt zwischen $0.5 \leq d/\langle d \rangle \leq 1.5$. Diese Polydispersität bedingt, dass zur Abschätzung der relevanten Größen (Kollisionszeit $t_{\text{Koll}}(m_{\text{eff}}(d))$ und Trägheitszahl $I(m(d))$) der kleinste Durchmesser $\min\{d_i\}$ verwendet wird. Als natürlich Einheit und für die Kohäsionszahl nutzen wir den mittleren Partikeldurchmesser $\langle d \rangle$.

4.3. Übergang zum Quasistatischen Fließen

Während schon die theoretische Beschreibung des quasistatischen Regimes nicht trivial ist [177, 83, 134], stellt die Formulierung einer regimeübergreifenden Theorie eine große Herausforderung dar. Vielversprechende Lösungsansätze berufen sich auf eine nicht-lokale Rheologie, d.h. die lokale Scherrate $\dot{\Gamma}$ am Ort \underline{r} wird von der Umgebung beeinflusst. Ob mittels propagierender Spannungsfluktuationen [177, 58], oder einer ortsabhängigen granularen Fluidität $\propto \dot{\Gamma}(\underline{r})/\mathcal{M}(\underline{r})$ [178, 179, 59], eine charakteristische Länge ist beiden Theorien inhärent. Diese auch Kooperativitätslänge genannte Größe wird zwar physikalisch motiviert, ist de facto aber ein scherratenabhängiger Fit-Parameter, welcher ähnlich der Korrelationslänge [180] am Übergang zum quasistatischen Regime divergiert [179]. Im quasistatischen Regime werden hingegen Werte $\approx \langle d \rangle$ gemessen [46]. Ist eine regimeübergreifende Deutung dieser Länge möglich? Ries et al. [181] identifizieren die Kooperativitätslänge mit der Eindringtiefe der Scherrate an Wänden. Ungeachtet der genauen Bedeutung der Kooperativitätslänge kann die nicht-lokale Theorie stationäre Geschwindigkeitsprofile für eine Vielzahl von Schergeometrien mit Wänden und somit definierten Randbedingungen vorhersagen.

Unger [134] untersuchte explizit die Scherung im quasistatischen Grenzfall mit Lees-Edwards-Randbedingungen. Dabei erklärte er den Fluss einer Partikelsorte als homogen und verwendete ein Schichtsystem aus Partikeln mit unterschiedlichen Reibungskoeffizienten zur Erzeugung einer Inhomogenität. Die lokale Scherrate in diesem Schichtsystem gehorcht einer von der Höhe abhängigen Kosinusfunktion. Die assoziierte Längenskala ist in der Größenordnung der Systemhöhe und demnach nicht identisch mit der Kooperativitätslänge. Ob Fluktuationen der lokalen Scherrate eine solche Längenskala offenbaren, soll als Nebenaspekt in den folgenden Abschnitten 4.3 - 4.5 überprüft werden. Radjaï & Roux [182] untersuchten Geschwindigkeitsfluktuationen im quasistatischen Regime und zeigten Parallelen zu turbulentem Fluss von Fluiden auf: nicht-gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung sowie langreichweitige Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen und superdiffusives Verhalten der Partikel gegenüber dem mittleren Geschwindigkeitsfeld. Trotz dieser Parallelen sind der quasistatische Fluss granularer Materie und Turbulenzen bei Flüssigkeiten fundamental unterschiedliche Phänomene. Aus diesem Grund wurden die Effekte auch als *granulance* betitelt.

Um die Eigenarten quasistatischer Scherung mit Lees-Edwards-Randbedingungen zu verstehen, betrachten wir die Korrelationslänge im stationären Fließzustand für verschiedene Scherraten ($I < 1$). Wir setzten $\eta = 0$ und variieren $\dot{\gamma}$ (in Einheiten von $\sqrt{\rho \langle d \rangle^2 / P}$) bei festen Reibungskoeffizienten $\mu = 0.5$ und $\mu_r = 0.1$. Alle Analysen dieses Abschnitts basieren auf dem Geschwindigkeitsfeld, das mit einer coarse-graining-Länge $\ell = 2 \langle d \rangle$ berechnet worden ist (siehe Abs. 2.2.2). Dieses Geschwindigkeitsfeld entspricht im zeitlichen Mittel $\underline{v} = \dot{\gamma} y \underline{e}_x$ (Abb. 4.3), d.h. im Einklang mit der Literatur [134, 183, 132] erzeugen die Randbedingungen homogenen Fluss.

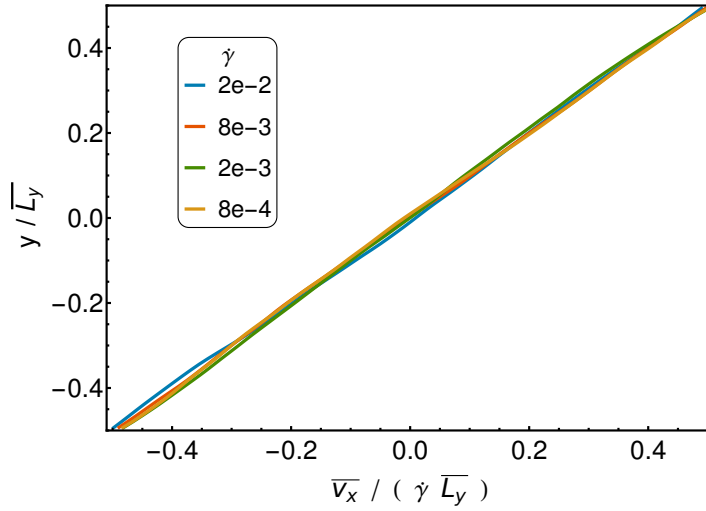


Abbildung 4.3.: Zeitlich gemitteltes Geschwindigkeitsprofil für unterschiedliche Scherraten. $N = 6000$, $L_x = 88$, $L_y > 70$ sowie $\mu = 0.5$ und $\mu_r = 0.1$.

4.3.1. Korrelationslänge und Fluktuationen

Ein häufig verwendetes Maß bei der Quantisierung von systeminternen Längenskalen ist die Korrelationslänge der Geschwindigkeitsfluktuationen. Pouliquen [180] zeigte durch Experimente mit einer schiefen Ebene, dass die Korrelationslänge im dichten Fluss kohäsionsloser granularer Materie mit abnehmender Scherrate zunimmt. Eine Divergenz bei Übergang zum quasistatischen Fluss konnte im Rahmen der Messgenauigkeit nicht festgestellt werden. Dieses Ergebnis motivierte die immer wiederkehrende Untersuchung sog. *Cluster* [165, 184, 185], deren Größe von der Scherrate bzw. Packungsdichte abhängt. Auch bei der Interpretation des mechanischen Verhaltens kohäsiver granularer Materie wird häufig auf die Korrelationslänge zurückgegriffen [64] und das Agglomerieren von Partikeln in Clustern diskutiert [24, 186]. In beiden Fällen handelt es sich um einfach zusammenhängende Agglomerate aus Partikeln in Kontakt. Im Fall kohäsiver Schüttgüter besaßen diese jedoch eine endliche Zugfestigkeit. Um objektiv über die Verwendung von Korrelationsmessungen in den folgenden Abschnitten urteilen zu können, soll hier ebendiese analysiert werden. Wir betrachten die durch Gl. (2.29) auf Seite 16 definierte räumliche Korrelationsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen und definieren Fluktuationen als Abweichungen vom linearen Geschwindigkeitsprofil

$$v'_\alpha(\underline{r}) = (\underline{v}(\underline{r}) - \dot{\gamma} y \underline{e}_x) \cdot \underline{e}_\alpha \quad . \quad (4.22)$$

Alle betrachteten Geschwindigkeits-Korrelationsfunktionen beziehen sich auf Geschwindigkeitsfluktuationen, weshalb der Strich (') im Folgenden der Übersicht halber weggelassen wird. Anstatt einer einzelnen Komponente kann auch der Geschwindigkeitsvektor \underline{v} in Gl. (2.29) zur Korrelationsmessung benutzt werden. Sowohl Geschwindigkeit, als auch Abstand ($\Delta \underline{r}$) sind vektorielle Größen. Die Anzahl an messbaren Korrelationsfunktionen, gegeben durch alle Kombinationen aus Geschwindigkeits- und Abstandsvektor, ist somit groß. Hier ist eine Beschränkung auf die Scherrichtung (x) bzw. senkrecht zur Scherrichtung (y) sinnvoll.

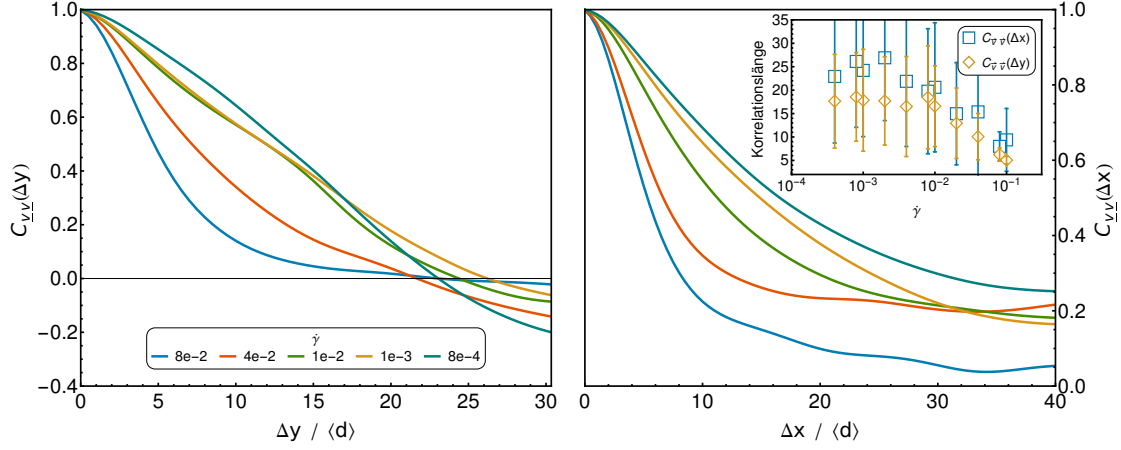


Abbildung 4.4.: Zeitlich gemittelte Korrelationsfunktionen der Geschwindigkeitsfluktuationen (vektoriell!), gemessen senkrecht (Δy , links) und parallel (Δx , rechts) zur Scherrichtung. Der Inset des rechten Graphen zeigt die Korrelationslänge, definiert als Abstand, bei welchem $C_{vv} = e^{-1}$ gilt. Die Balken im Inset entsprechen der Standardabweichung. Der Messfehler des Mittelwerts entspricht in etwa der Symbolgröße.

In Einklang mit der Literatur [180] sind die Geschwindigkeitsfluktuationen im System bei Annäherung an den quasistatischen Zustand zunehmend räumlich korreliert (siehe Abb. 4.4). Trotz des nicht-exponentiellen Abfalls für kleine $\dot{\gamma}$ definiert der Funktionswert $C_{\underline{v}'\underline{v}'} = e^{-1}$ eine Korrelationslänge und damit eine Clustergröße, welche unterhalb eines richtungsabhängigen Schwellwerts ($\dot{\gamma} \leq 10^{-3}$) konstant ist (siehe Inset). Diese Sättigung deutet an, dass die Korrelationen die Systemgrenzen erreicht haben ($L_y \approx L_x = 88$). Ohne den Jamming-Übergang für diese reibungsbehafteten Systeme hier genauer quantifizieren bzw. diskutieren zu wollen, liegt der Schluss nahe, das System als verkeilt zu betrachten. Für kleinere Scherraten agieren die Partikel kollektiv als ein Cluster [165, 187], in welchem Kraftketten perkolieren [51, 188, 189]. Diese Feststellung impliziert, dass die Systemgröße den Übergang zur quasistatischen Deformation beeinflusst. Mit Hilfe des Seitenverhältnis der Simulationszelle lässt sich die Anisotropie der Korrelationslänge beinahe wegskalieren (nicht gezeigt). Ob eine Richtungsabhängigkeit der Korrelationslänge berücksichtigt werden muss [180] oder nicht [182], kann auf Basis dieser Daten nicht geklärt werden. Zweifelsohne ist jedoch die Korrelationsfunktion richtungsabhängig. Dabei widerspricht die unvollkommene Korrelation in Scherrichtung (Δx) der zu erwartenden Translationsinvarianz, d.h. $\underline{v} = v(y) \underline{e}_x$. Es existiert eine Komponente $v(x) \underline{e}_y$, die im zweiten Teil dieses Abschnitts genauer untersucht wird.

Zunächst soll die Korrelationsfunktion auf Basis der Mohr-Coulomb-Theorie (siehe Kap. 2.1.2 und [11]) ausgerechnet werden. Charakteristisch für die quasistatische Deformation ist das Auftreten von Scherheterogenitäten [13]. Warum ist das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsprofil bei periodischen Randbedingungen dennoch linear (Abb. 4.3)? Vorstellbar wäre, dass die Scherung als Abfolge von lokalisierten Gleiter-

eignissen auf unterschiedlichen Höhen stattfindet. Das Scherband ist ohne Wand also räumlich nicht fixiert. In Anlehnung an die klassische Mohr-Coulomb-Theorie gehen wir von einem infinitesimal dünnen Scherband aus und berechnen in einem eindimensionalen Modell die Korrelationsfunktion $C_{v_x v_x}(\Delta y)$ unter der Annahme, dass dieses Scherband im Laufe der Zeit in verschiedenen Höhen y auftritt. Hierzu unterteilen wir das System in zwei Blöcke, die durch ein Scherband auf der Höhe y_{sb} getrennt werden ($0 < y_{\text{sb}} \leq L_y$) und mit der vorgegebenen Scherrate übereinander abgleiten (siehe Abb. 4.5 links). Die Erhaltung der Schwerpunktgeschwindigkeit (Null) und die Lees-Edwards-Randbedingungen ($v_{\text{hi}} - v_{\text{lo}} = \dot{\gamma} L_y$) legen die Geschwindigkeit der Schicht in Höhe y auf

$$v_x(y, y_{\text{sb}}) = \dot{\gamma} \left(y_{\text{sb}} + \frac{L_y}{2} - L_y \mathcal{H}(y_{\text{sb}} - y) \right) \quad (4.23)$$

fest. Hierbei ist \mathcal{H} die Heaviside-Funktion. Da die Geschwindigkeit an den Systemrändern nicht durch Wände fixiert wird, ist $v_x(y) > \dot{\gamma} y$ möglich. Mit Gleichung (4.23) kann nun die Korrelationsfunktion von v_x senkrecht zur Scherrichtung berechnet werden:

$$C_{v_x v_x}(\Delta y, y_{\text{sb}}) \propto \int_{-L_y/2}^{L_y/2} v'_x(y, y_{\text{sb}}) v'_x(y + \Delta y, y_{\text{sb}}) dy \quad , \quad (4.24)$$

welche auch von der Position des Scherbands abhängt. Nimmt man eine Gleichverteilung aller Scherbandhöhen y_{sb} an, ergibt sich im Mittel

$$C_{v_x v_x}(\Delta y) = \frac{L_y^2 - 6L_y \Delta y + 6\Delta y^2}{L_y^2} \quad . \quad (4.25)$$

Ein Vergleich mit der gemessenen Korrelationsfunktion ist im rechten Graphen von Abb. 4.5 dargestellt (schwarz gestrichelte Kurve). Der Grenzfall quasistatischer Deformation zeigt qualitativ gute Übereinstimmungen mit diesem Modell. Im Mittel wird die Korrelation jedoch unterschätzt. Dies liegt zum einen an der Annahme gleichverteilter Scherbandpositionen und des endlichen Zeitintervalls zur Messung der Korrelationsfunktion. Selbst simple statistische Modelle zeigen eine Korrelation der Scherbandposition [190, 191]. Die Mittelung über die Schar aller Scherbandpositionen impliziert, dass das Messintervall auch lang genug ist und alle Positionen erreicht wurden. Es ist fraglich, ob dies gegeben ist. Zum anderen ist die Breite von Scherbändern in granularer Materie endlich ($\approx 10\langle d \rangle$) [13, 192]. Offenbaren Momentaufnahmen der Geschwindigkeitsfluktuationen evtl. ein genaueres Bild der Scherlokalisierung?

Die Momentaufnahmen des Geschwindigkeitsfeldes $v_x(y)$ (linker Graph Abb. 4.6) zeigen deutliche Abweichungen vom linearen Verlauf. Große Bereiche bewegen sich kollektiv (orange Kurve), dennoch ist $v_x(y)$ weit entfernt von einer Stufenfunktion. Erschwerend kommt hinzu, dass die Momentaufnahme keine Differenzierung zwischen plastischer und elastischer Haufwerkdeformation zulässt. Das fluktuierende Geschwindigkeitsfeld lässt sich nicht einheitlich durch eine charakteristische Funktion beschreiben. Aufgrund der nicht definierten Randbedingungen für das Geschwindigkeitsfeld soll im Folgenden

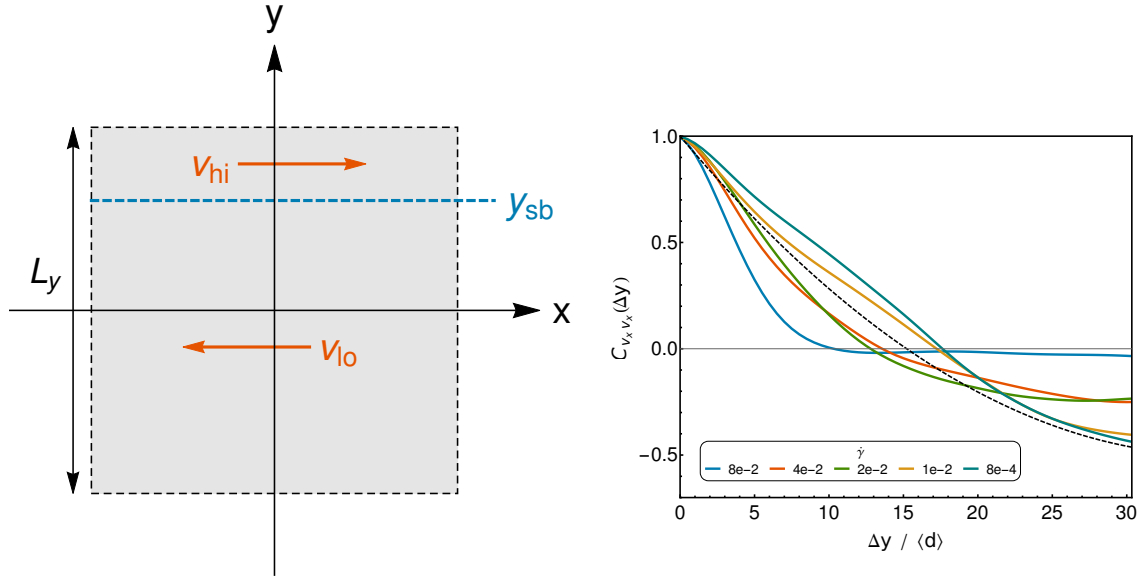


Abbildung 4.5.: Bild zur Veranschaulichung des Modells (links). Korrelationsfunktionen der Geschwindigkeitsfluktuationen v'_x senkrecht zur Scherrichtung (rechts). Gl. (4.25) ist schwarz gestrichelt aufgetragen.

die lokale Scherrate $\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$ (Gl. (2.26)) betrachtet werden. Randbedingungen für diesen Tensor lassen sich wie folgt formulieren:

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{L_y} \int_{L_y} \dot{\Gamma}_{yx}(y) dy \quad , \quad (4.26)$$

$$\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}(x, y) = \dot{\Gamma}_{\alpha\beta}(x \pm L_x, y) \quad \forall \quad y \quad , \quad (4.27)$$

$$\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}(x, y) = \dot{\Gamma}_{\alpha\beta}(x, y \pm L_y) \quad \forall \quad x \quad . \quad (4.28)$$

Im räumlichen Mittel verschwinden alle Komponenten bis auf $\dot{\Gamma}_{yx}$, dessen Mittel der angelegten Scherrate entspricht. Als Fluktuationsmaß dient das zweite Moment bzw. die Varianz (siehe rechten Graph in Abb. 4.6). Wie zu erwarten, nehmen die relativen Fluktuationen mit abnehmender Scherrate zu: $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})/\dot{\gamma}^2 \propto \dot{\gamma}^{-1/2}$ für $\dot{\gamma} > 10^{-3}$. Nach da Cruz et al. [62] kann dieser Zusammenhang wie folgt verstanden werden: Im stationären Zustand wird die geleistete Arbeit $\propto \dot{\gamma} \tau$ dissipiert. Ist die Dissipationsrate durch die kinetische Energie der Fluktuationen ($\propto \delta v^2$) pro Inertialzeit ($\sqrt{m/P}$) gegeben, folgt $\delta v^2 \propto \mu_{\text{makro}}(\dot{\gamma}) \cdot \dot{\gamma}$. Dass die Geschwindigkeitsfluktuationen proportional zu den Fluktuationen der Scherrate sind und damit $\delta v^2 \propto \text{Var}(\dot{\Gamma})$, ist durchaus plausibel [193]. In dem betrachteten Messbereich weicht $\mu_{\text{makro}}(\dot{\gamma})$ jedoch leicht vom linearen Verlauf ab (Ähnliches berichten [62, 66, 67]). Hier kann das Verhalten näherungsweise durch $\mu_{\text{makro}} \propto \sqrt{\dot{\gamma}}$ beschrieben werden. Daraus ergibt $\text{Var}(\dot{\Gamma})/\dot{\gamma}^2 \propto \dot{\gamma}^{-1/2}$.

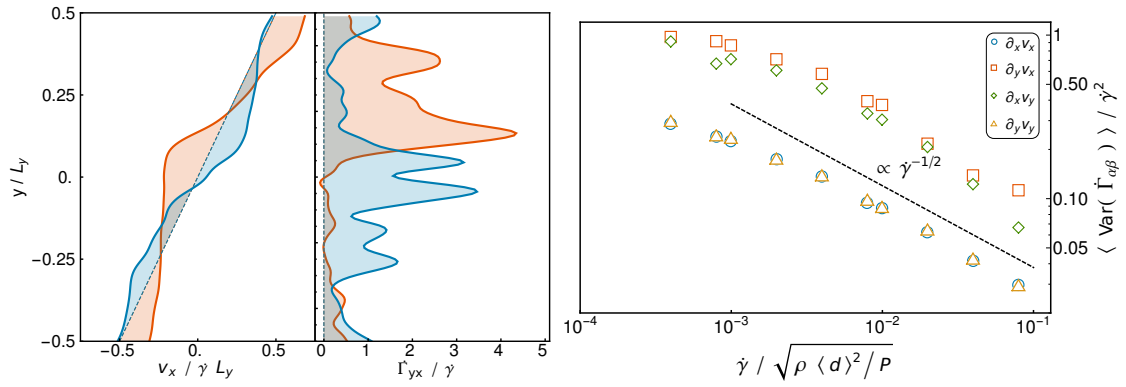


Abbildung 4.6.: Zwei Momentaufnahmen des Geschwindigkeitsfeld $v_x(y)$ und die entsprechende Scherrate $\dot{\Gamma}_{yx}(y)$ bei $\dot{\gamma} = 10^{-3}$ (links) und Varianz der lokalen Scherrate $\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$ in Abhängigkeit von $\dot{\gamma}$ (rechts).

4.3.2. Eigenarten quasistatischer Scherung mit Lees-Edwards-Randbedingungen

Die Größe der Fluktuationen senkrecht zur Scherrichtung $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{xy})$ ist vergleichbar mit den Fluktuationen in Scherrichtung $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})$. Schon die abfallende Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen in Scherrichtung (vgl. Abb. 4.4) ließ vermuten, dass sich die Partikel auch senkrecht zur Scherrichtung bewegen. Da die Schwerpunktschwindigkeit erhalten bleibt, kann ein endliches $\dot{\Gamma}_{xy}$ nur durch lokale Rotation entstehen. Schon frühe Artikel zu DEM-Simulationen berichteten von wirbelähnlichen Geschwindigkeitsfeldern im Fluss granularer Materie [194, 195]. Die Existenz von Wirbeln sowie deren Einfluss auf das Fließverhalten wird bis heute thematisiert [196–198]. P. Rognon und I. Einav nutzen z.B. die Parallele zur turbulenten Strömung und wenden einfache Turbulenzmodelle („eddy viscosity“ [183, 199]) an, um das Fließverhalten zu verstehen. Die Idee wurde jedoch schon von der Groupement De Recherche Milieux Divisés vorgeschlagen [15], der eine nicht-lokale Rheologie durch Cluster auf Basis der Prandtlschen Mischlänge [200] diskutiert. Der in der lokalen Theorie verwendete Partikeldurchmesser wird durch eine Clusterlänge (Wirbeldurchmesser) ersetzt, welche ortsabhängig ist. Es stellt sich heraus, dass diese Längenskala in Wandnähe, wo die Scherung lokalisiert, abnimmt [132]. Wände hemmen die korrelierte Bewegung in Wirbeln, wäre eine Lesart dieses Ergebnis. Verhindern Wirbel im Falle periodischer Randbedingungen die Ausbildung stationärer Scherbänder?

Török et al. [191] untersuchten mit einem stochastischen Gittermodell die zeitliche Entwicklung von Scherlokalisierungen und kamen zu folgendem Ergebnis: Nach einer Anscherphase, in welcher die Scherlokalisierung jeden Bereich des Systems einmal durchlaufen hat, entwickeln sich bevorzugte Pfade, d.h. stationäre Scherbänder. Der Rest des Systems ist dabei leicht verdichtet. Eine periodische Durchmischung des Systems durch Rotation würde diesen Anschervorgang in bestimmten Abständen initiieren und so stationäre Scherbänder unterdrücken. Wie im letzten Abschnitt gezeigt, ist im quasistatischen Grenzfall die Bewegung des gesamten Systems korreliert. Es zeigt sich, dass im

Gegensatz zu wandgetriebenen Simulationen Lees-Edwards-Randbedingungen die Rotation des gesamten Systems zulassen. Zu bestimmten Zeitpunkten kann eine Rotation der gesamten Packung beobachtet werden (siehe Abb. 4.7(a)). Diese Rotationsereignisse „mischen“ das System, sodass Pfade vorheriger Scherlokalisierungen „vergessen“ sind und bieten einen möglichen Mechanismus an, welcher stationären Scherbändern entgegenwirkt. Warum rotiert das System nur zu gewissen Zeitpunkten?

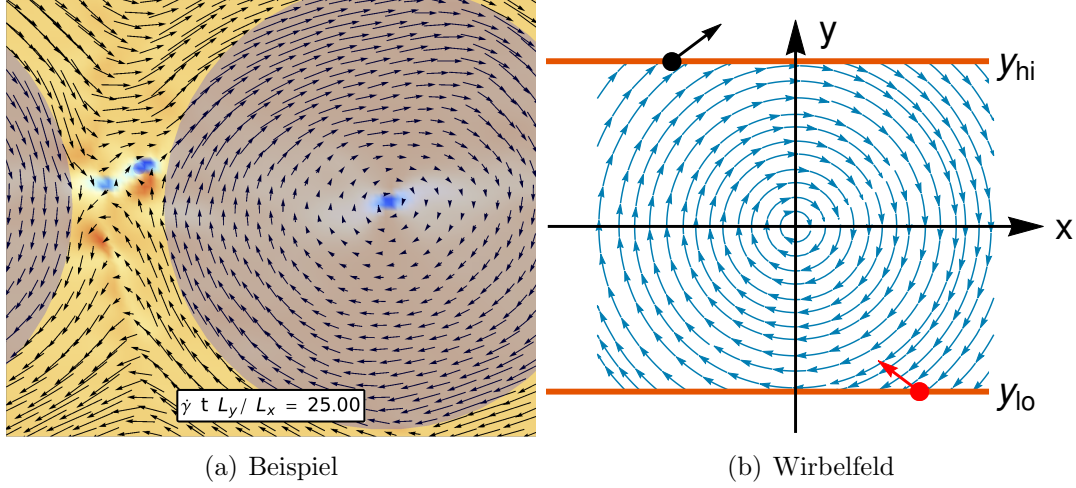


Abbildung 4.7.: (a) Beispielbild eines Geschwindigkeitsfeldes, unterlegt mit der \underline{e}_z -Komponente des Rotationsfeldes und dem detektierten Wirbel (transparent blauer Kreis); (b) Wirbelfeld unter Lees-Edwards-Randbedingungen.

Grund dafür ist die explizite Zeitabhängigkeit der Randbedingungen (vgl. Gl. (4.17)). Die endliche Breite des Systems verursacht eine Periodizität in der Bewegung, d.h. zu bestimmten Zeitpunkten ist die Verschiebung der periodischen Fortsetzungen in Scherrichtung ein Vielfaches der Systembreite L_x und damit effektiv Null. Zu allen anderen Zeitpunkten bekommen Partikel, welche das System in y -Richtung verlassen, neben der Geschwindigkeitsdifferenz auch einen räumlichen Versatz in x -Richtung beim Wiedereintritt auf der anderen Seite aufaddiert. Dieser räumliche Versatz ist inkompatibel mit Rotationsfeldern, wie folgendes Beispiel verdeutlichen soll. Wir betrachten das Vektorfeld

$$\underline{v}(\underline{r}) = -\dot{\gamma} \underline{e}_z \times \underline{r} \quad , \quad (4.29)$$

das einer Drehung mit der Frequenz $\dot{\gamma}$ entspricht (siehe Abb. 4.7(b)). Der Erhalt der Schwerpunktgeschwindigkeit (Null) bestimmt die Höhe des Wirbelzentrums ($y = 0$), nicht aber dessen x -Komponente. Ferner muss die Randgeschwindigkeit im Einklang mit der Scherrate sein, weshalb $\omega \equiv -\dot{\gamma}$ auch vorgegeben ist. Nun überprüfen wir die Kompatibilität dieses Feldes mit den Randbedingungen, indem wir einen Punkt auf dem Systemrand in y -Richtung betrachten. Nach Gleichung (4.17) muss

$$\underline{v}(\underline{r}_{hi}) \stackrel{!}{=} \underline{v}(\underline{r}_{lo}) + \dot{\gamma} L_y \underline{e}_x \quad (4.30)$$

auf dem Rand gelten. Einsetzen von Gleichung (4.29) ergibt die beiden Bedingungen $(y_{hi} - y_{lo}) = L_y$ und $x_{hi} = x_{lo}$. Letztere ist für Lees-Edwards-Randbedingungen

i.d.R. nicht erfüllt, da jedes Partikel, das den Systemrand in y -Richtung übertritt eine Verschiebung in x -Richtung erfährt. Nur zu den Zeitpunkten, die der Bedingung $\text{Mod}(\dot{\gamma} t L_y, L_x) = 0$ genügen, ist das Rotationsvektorfeld (4.29) kompatibel mit den Randbedingungen. Es bleibt zu zeigen, dass das gesamte System an diesen ausgewählten Zeitpunkten rotiert.

Um die Rotation des Systems zu quantifizieren, greifen wir auf eine zirkulationsbasierte Wirbeldetektion zurück, welche von Rognon et al. [199] entwickelt wurde. Ausgangspunkte bildet die Zirkulation des normierten Geschwindigkeitsfelds

$$\Omega = \frac{1}{\oint_{\partial A} d\mathbf{l}} \oint_{\partial A} \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} d\mathbf{l} \quad . \quad (4.31)$$

Diese wird an Punkten auf einem Quadratgitter mit Gitterkonstanten $2\langle d \rangle$ ausgewertet. Der dabei benutzte Pfad ∂A entspricht einem Kreis mit Umfang 2π . Zeigen die Geschwindigkeitsvektoren aller Punkte auf ∂A tangential zum Kreis ($\mathbf{v} \parallel d\mathbf{l}$) in gleicher Richtung, ist $\Omega = \pm 1$, d.h. der Kreis würde einen Wirbel umschließen. Ein sogenannter Anti-Wirbel, wie z.B. aus dem Magnetismus bekannt [201], hätte den Wert $\Omega = 0$. Nutzt man einen passend Schwellwert für Ω , ergeben sich potentielle Wirbelzentren aus den Quadratgitterpunkten. Da i.A. mehrere Wirbel im System koexistieren können, werden zusammenhängende Quadratgitterpunkte mit $\Omega \geq$ Schwellwert ausgemacht und deren Schwerpunkt als potentielles Wirbelzentrum bestimmt. Nun wird die Zirkulation auf Kreisen mit wachsenden Radien R um die identifizierten Wirbelzentren berechnet. Mit Hilfe eines weiteren Kriterium für $\Omega(R)$ kann eine Wirbelgröße R festgelegt werden. Rognon et al. [199] benutzten das Maximum von $\Omega(R)$. Qualitativ ändern sich die Resultate nicht, wenn man den Radius R benutzt, bei welchem $\Omega(R)$ dem anfänglichen Schwellwert entspricht. Die transparent-blaue Kreisscheibe in Abb. 4.7(a) ist das Resultat einer solchen Wirbeldetektion.

Unterschreitet die Scherrate einen gewissen Schwellwert ($\dot{\gamma} \approx 10^{-2}$), treten in periodischen Abständen große Wirbel auf, deren Radius im quasistatischen Zustand die Systemgrenzen erreicht, wie Abb. 4.8(a) demonstriert. Abgebildet ist der stationäre Zustand, wobei alle Zeitpunkte, an denen $\text{Mod}(\dot{\gamma} t L_y, L_x) = 0$ gilt, mit gestrichelten Linien gekennzeichnet sind. Einen eindeutigen Hinweis für das periodische Auftreten von Wirbel liefert die Fouriertransformierte (Abb. 4.8(b)). Vereinzelt wird in der Literatur auf die „Zeitperiodizität“ von Lees-Edwards-Randbedingungen hingewiesen [202], jedoch nur bei Systemen aus wenigen Partikeln. Hier betrachten wir eine große Partikelanzahl. Die Partikel agieren im quasistatischen Grenzfall jedoch, wenn möglich, als ein Cluster. Dass neben $\omega_1 = \dot{\gamma} \overline{L_y}/L_x$ auch $\omega_2 = 2\dot{\gamma} \overline{L_y}/L_x$ ausgezeichnet ist, hebt die bisher unbeachtete Rolle des Seitenverhältnis L_y/L_x hervor. Auch zu Zeitpunkten, an denen die Verschiebung der periodischen Fortsetzungen in y -Richtung der halben Systembreite ($L_x/2$) entspricht, treten Wirbel auf. Dementsprechend wird auch bei Simulationen mit halber Systembreite das Partikelkollektiv zu den ausgezeichneten Zeitpunkten rotieren. Eine Vervielfachung der Systembreite würde dagegen weitere Maxima („Obertöne“) neben ω_1 und ω_2 auszeichnen. Man bedenke, dass zu den ausgewählten Zeitpunkten auch Wirbel in allen periodischen Fortsetzungen in x -Richtung auftreten. Abb. 4.7(a) zeigt, dass die Wirbel in gleicher Richtung rotieren und durch

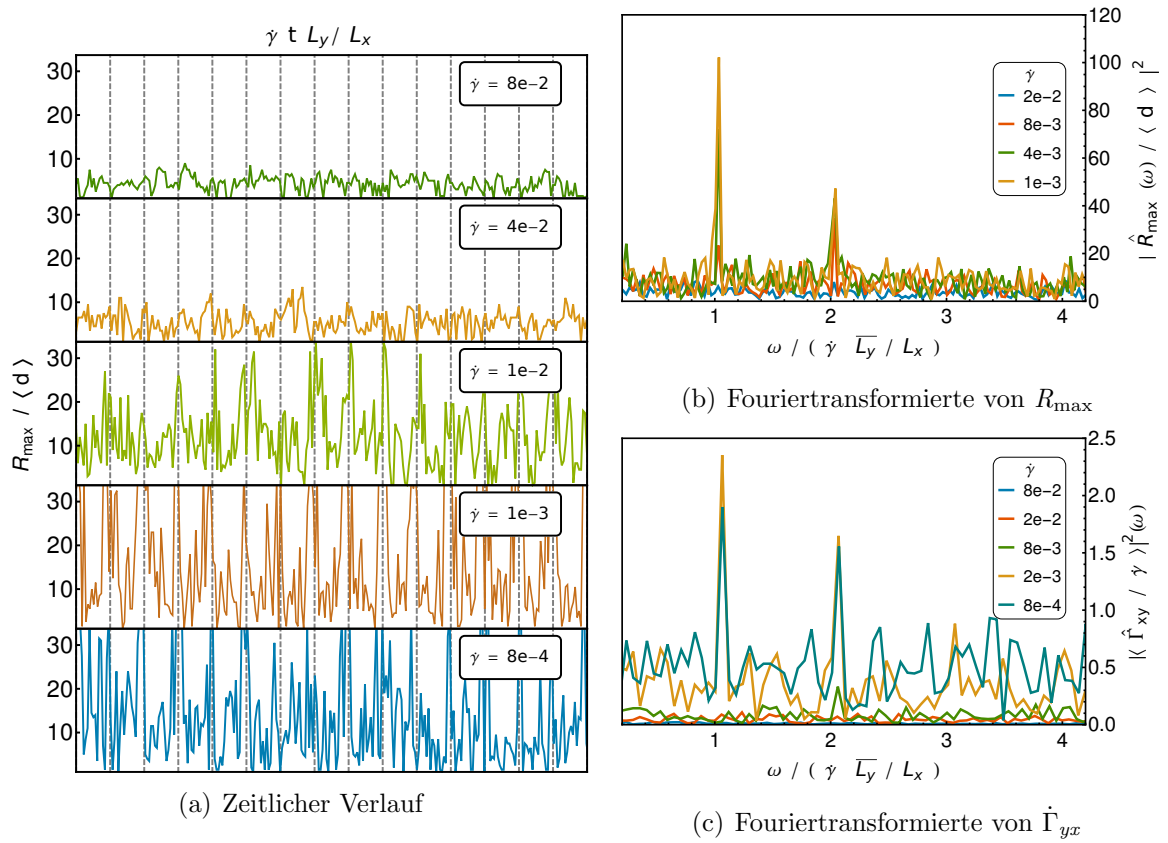


Abbildung 4.8.: (a): Zeitlicher Verlauf des maximalen Wirbelradius; (b) Fouriertransformierte des zeitlichen Verlaufs des max. Wirbelradius und (c) Fouriertransformierte des zeitlichen Verlaufs von $\dot{\Gamma}_{xy}$.

eine Art Scherzone senkrecht zur Scherrichtung getrennt sind. Dies erklärt die großen Fluktuationen von $\dot{\Gamma}_{xy}$, welche mit der Rotation korreliert sind, siehe Abb. 4.8(c).

Für das hier gewählte Seitenverhältnis ist keine Frequenz größer als $\omega_2 = 2 \dot{\gamma} \overline{L_y} / L_x$ ausgezeichnet (Abb. 4.8(b)). Aufgrund dessen ist zu erwarten, dass ab einer gewissen Scherzellenhöhe die Rotation des gesamten Systems unterdrückt wird. Um dies zu prüfen, wurde die Anzahl der Partikel bei festgehaltener Systembreite ($L_x = 88$) variiert und die Geschwindigkeitsfelder im stationären Fließzustand ausgewertet. Die Abhängigkeit des Seitenverhältnis von der Partikelanzahl ist im Inset von Abb. 4.9 (rechts) dargestellt. Ab einem Seitenverhältnis $\overline{L_y} / L_x > 2.5$ existieren zwar noch große Wirbel (nicht gezeigt), diese treten jedoch nicht mehr periodisch auf (Abb. 4.9, links). Des Weiteren ist die Wirbelgröße in diesen Simulationen durch die Systembreite beschränkt und die vertikale Position großer Wirbel ($R_{\max} \propto \mathcal{O}(L_x)$) nicht mehr in der Systemmitte fixiert. Interpretiert man den Wirbelradius als Korrelationslänge [132, 199], ist anzunehmen, dass diese durch $\min\{L_x, L_y\}$ beschränkt ist und die Simulationsergebnisse vom gewählten Seitenverhältnis abhängen. Anders als zum Beispiel beim Ising Modell [203] wird der Einfluss der Systemgröße bei Simulationen mit Lees-Edwards-Randbedingungen meist vernachlässigt. Lediglich Campbell [161] erwähnt kurz, dass kein Einfluss für $L \gg \langle d \rangle$ gefunden wurde. Einschlägige Arbeiten mit dieser Methode [182, 189, 204, 64, 134, 183]

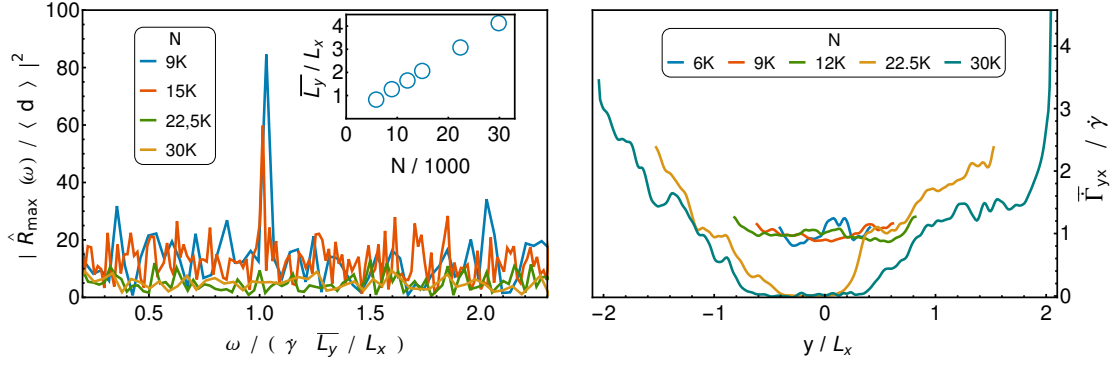


Abbildung 4.9.: *Finite-Size-Analyse des quasistatischen Grenzfalls kohäsionsloser Materie. Links: zeitliche Fouriertransformierte des max. Wirbelradius für verschiedene Systemhöhen. Das Seitenverhältnis für die gewählte Systembreite in Abhängigkeit der Partikelanzahl ist im Inset dargestellt. Rechts: Zeitliche gemittelte Scherratenprofile $\bar{\Gamma}_{yx}(y)$ für verschiedene Systemgrößen.*

nutzten $\bar{L}_y / L_x < 2$. In den hier durchgeführten quasistatischen Simulationen führen größere Seitenverhältnisse im zeitlichen Mittel zu einer heterogenen Scherung, siehe Abb. 4.9, rechts. Die über den stationären Zustand gemittelten Scherratenprofile offenbaren, dass ab $N \geq 22500$ ($\bar{L}_y / L_x > 2.5$) im mittlere Bereich der Scherzelle $\bar{\Gamma}_{yx} \approx 0$ gilt. Lediglich ein Bereich der Höhe $\approx 2 L_x$ um den Systemrand bei $y = L_y/2$ wird geschert. Dieser unvollständige Scherübertrag erinnert an Scherung mit Wänden [65, 60, 181]. Mit einer Eindringtiefe von $L_x \gg \langle d \rangle$ liegt die Breite des scheraktiven Bereichs jedoch weit über den üblichen Scherbandbreiten [13, 71, 205, 46]. Wir interpretieren den unvollständigen Scherübertrag für $\bar{L}_y / L_x > 2.5$ als *Finite-Size-Effekt*, mit der Systembreite als limitierenden Faktor. Die eigentliche Scherung ist auf einen Bereich $y \approx L_y/2 \pm L_x$ beschränkt.

Zusammenfassung: Untersucht wurden Korrelationen und Fluktuationen des Geschwindigkeitsfelds bei planarer Scherung mit Lees-Edwards-Randbedingungen unter Variation der Scherrate $\dot{\gamma}$. Im Einklang mit der Literatur wurde gezeigt, dass die Korrelationslänge mit abnehmendem $\dot{\gamma}$ steigt. Erreicht die Korrelationslänge die Systemgröße, agiert das System (wenn möglich) als ein Cluster. Es ist davon auszugehen, dass dieser Punkt mit dem Übergang zum quasistatischen Fließen identifiziert werden kann. Die langreichweitige Korrelation bei quasistatischer Scherung führt dazu, dass das Geschwindigkeitsfeld vom Seitenverhältnis des Systems abhängt, ein in der Literatur noch nicht diskutiertes Phänomen. Des Weiteren konnten in Abhängigkeit des Seitenverhältnis zwei Regime identifiziert werden: Für $\bar{L}_y / L_x < 2.5$ rotiert das System in periodisch auftretenden Zeitpunkten als Ganzes, während für $\bar{L}_y / L_x > 2.5$ die Systembreite den scheraktiven Bereich auf eine Zone $y \approx L_y/2 \pm L_x$ beschränkt. In beiden Grenzfällen existieren Wirbel, welche die Translationsinvarianz von \underline{v} in Scherrichtung brechen. Dies ist ein möglicher Mechanismus, der stationäre Scherbänder unterdrückt. Dass Finite-Size-Effekte dem quasistatischen Grenzfall inhärent sind, ist zwingende Konsequenz der divergieren-

den Korrelationslänge. Wir beschränken uns im Folgenden auf die Untersuchung des scheraktiven Bereichs und nutzen im Einklang mit der Literatur Seitenverhältnisse $\overline{L}_y/L_x < 2$.

4.4. Einfluss der Reibung

Reibung verursacht präparationsabhängiges Verhalten granularer Materie [206] und ist für eine Vielzahl ihrer charakteristischen Merkmale verantwortlich: Reibung stabilisiert gehäuftes Schüttgut [150], beeinflusst Kraftverteilung [207, 208] und Struktur [85, 209] des Haufwerks und erhöht dessen Elastizität [210]. Darüber hinaus ist bekannt, dass der Druck am Boden eines Silos viel geringer als der durch die Gewichtskraft zu erwartende Druck ist [211] (Janssen-Effekt). Grund dafür ist Reibung zwischen Silowand und Schüttgut, welche einen Druckabfall auf einer Längenskala proportional zum Silodurchmesser verursacht. Neuere Arbeiten schreiben sogar Dilatanz allein der Reibung zu [212]. Auch der Jamming-Übergang wird durch Reibung beeinflusst [213]. In diesem Abschnitt wird überprüft, ob Reibung die Rotationsergebnisse erst ermöglicht. Des Weiteren wird das Feld der lokalen Scherrate genauer analysiert. Die räumliche Verteilung scheraktiver Bereiche soll weiteren Aufschluss über Scherlokalisierung geben. Dabei wird ausschließlich quasistatische Scherung berücksichtigt, welche durch Wahl einer ausreichend kleinen Scherrate ($\dot{\gamma} = 5 \cdot 10^{-4}$) gegeben ist.

Wir betrachten zunächst den Einfluss von Gleitreibung isoliert und setzen $\mu_r = 0$. Falls notwendig, werden Messgrößen im stationären Zustand über einen Scherweg $\dot{\gamma} \Delta t \geq 10$ gemittelt. Gestrichelte Linien in Graphen mit μ als Abszisse deuten den Wert für $\mu = 0$ an, welcher Simulationen ohne Reibung entstammt.

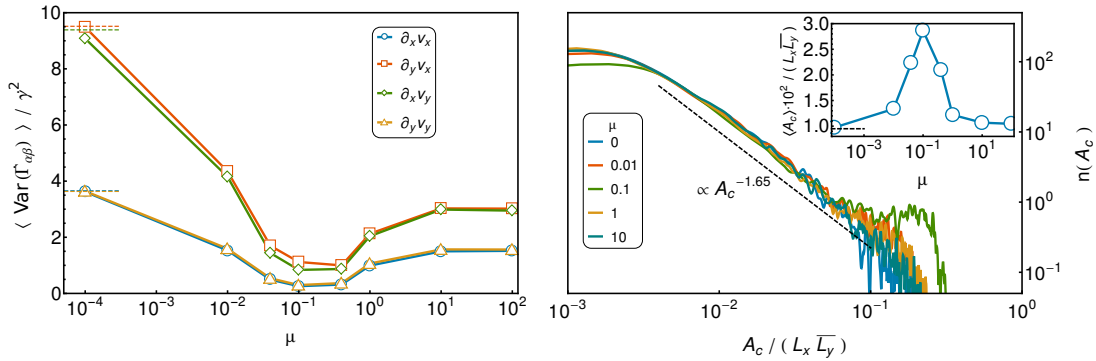


Abbildung 4.10.: Einfluss der Gleitreibung auf die Varianz der lokalen Scherrate (links) und Anzahlverteilung der Flächen (rechts). Der Inset zeigt dabei die mittlere Fläche an.

Die Varianz von $\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$ offenbart eine nicht monotone Abhängigkeit vom mikroskopischen Reibungskoeffizienten (Abb. 4.10, links) mit lokalem Minimum ($0.1 \leq \mu \leq 0.4$) und Sättigungsbereich für große μ . Sättigung bei großem μ kann auch bei anderen Messgrößen, wie z.B. dem makroskopischen Reibungskoeffizienten [207], beobachtet werden. Die lokale Scherrate fluktuiert in reibungsbehafteten Systemen weniger stark als im reibungslosen Fall und folgt damit dem Trend von Packungsdichte, Koordinationszahl und Scherbandbreite [214]. Die Varianz von $\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$ lässt allerdings keine Rückschlüsse auf die Form und Verteilung von Bereichen großer Scheraktivität zu, die im Folgenden analysiert werden soll. Zu diesem Zweck diskretisieren und binarisieren wir das zweidimensionale Feld der lokalen Scherrate $\dot{\Gamma}_{yx}$ mit der Diskretisierungslänge $\langle d \rangle$ und dem

Schwellwert $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})^{1/2}$, wodurch die Extrema der Verteilung mit positiver Abweichung berücksichtigt werden. Das Feld zerfällt so in zusammenhängende Teilbereiche deren Fläche und Form analysiert werden kann. Hier beschränken wir uns auf die Fläche und betrachten die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung (kurz: WDV) der Flächen im stationären Zustand, dargestellt im rechten Graphen von Abb. 4.10. Die Verteilung folgt unabhängig von μ für Flächenanteile kleiner $L_x L_y / 10$ einem Potenzgesetz mit schwellwertabhängigem Exponenten (hier: 1.65). Scherbandähnliche Bereiche, die sich über das gesamte System erstrecken und eine Breite von $\approx 10\langle d \rangle$ haben, wären am oberen Ende der Verteilung zu finden $A_c / (L_x L_y) \geq 1/10$. Dieses Ende der Verteilung ist vor allem für Reibungskoeffizient $\mu \approx 0.1$ besonders ausgeprägt, bei welchem die Varianz minimal wird. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 4.11 typische Felder der lokalen Scherrate für unterschiedliche Reibungskoeffizienten aufgetragen. Während in den beiden Extremfällen $\mu = 0$ und $\mu = 10$ die Bereiche großer Scherrate über das gesamte System verteilt sind, ist die Scherung für $\mu = 0.1$ zeitweise lokalisiert.

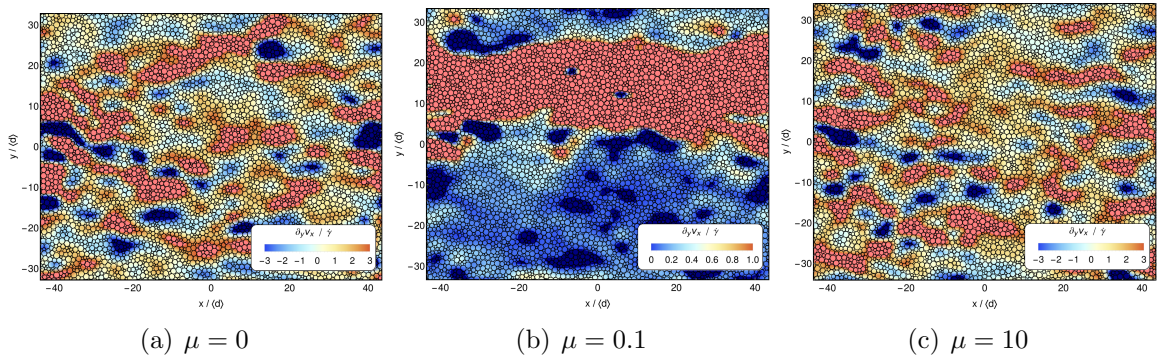


Abbildung 4.11.: Momentaufnahmen der lokalen Scherrate für verschiedene μ . Bereiche, die oberhalb des Wertebereichs liegen, sind pink, unterhalb dunkelblau gefärbt.

Der Grund für das nichtlineare Verhalten liegt im Wechsel des mikroskopischen Deformationsmechanismus. Zunehmende Reibung verringert stetig den Anteil gleitmobilisierter Kontakte im Haufwerk [215]. Im Regime kleiner Reibungskoeffizienten ($\mu \leq 0.1$) bewirkt der größer werdende Gleitreibungsschwellwert eine zunehmende Korrelation senkrecht zur Scherrichtung (Abb. 4.12 links). Bei nahezu unveränderter Struktur (Packungsdichte, Koordinationszahl und Kontaktanisotropie) bewegen sich Partikelschichten zunehmend kollektiv und die Scherung lokalisiert temporär. Größere Reibungskoeffizienten ($\mu > 0.1$) verursachen hingegen eine Frustration der Partikelbewegung im Haufwerk und erzwingen eine Volumenzunahme bei Scherung. Rollen wird gegenüber Gleiten bevorzugt, Packungsdichte und Koordinationszahl nehmen ab und eine Kontaktanisotropie entsteht (siehe [118, 62, 208] inkl. Referenzen). Diese Verlagerung des Mobilisationsmechanismus, die mit einer strukturellen Änderung einhergeht, führt zu einer Abnahme der Korrelation. Das Feld der lokalen Scherrate weist für $\mu > 1$ keine großen scheraktiven Bereiche auf.

Dennoch ist Reibung nicht für die periodisch auftretenden Wirbel verantwortlich, wie Abb. 4.12 (rechts) veranschaulicht. Auch im reibungslosen Fall rotiert die Packung in periodischen Abständen. Lediglich die Magnitude des Peaks bei $\omega = \dot{\gamma} L_y / L_x$ ändert

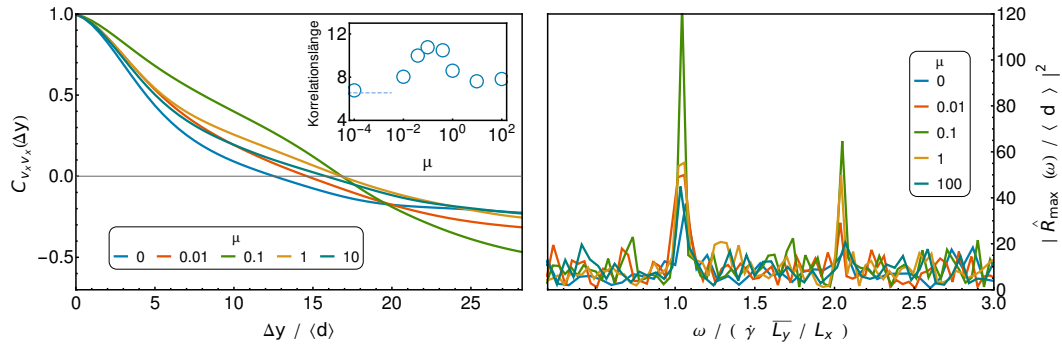


Abbildung 4.12.: Links: Korrelationsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen v_x senkrecht zur Scherrichtung. Der Inset zeigt die Korrelationslänge, definiert als Abstand bei dem $C_{v_x v_x}(\Delta y) = e^{-1}$ ist. Rechts: Fouriertransformierte von $R_{\max}(t)$.

sich mit μ , ein Indiz für den Zusammenhang zwischen Wirbelgröße und Korrelationslänge [199, 132].

Neben Gleitreibung beeinflusst auch Rollreibung die Struktur des Haufwerks [216], vor allem bei kohäsiven Schüttgütern [150, 151]. Das Verhältnis der beiden Reibungskoeffizienten entscheidet über die bevorzugte Art der Kontaktmobilisierung, die Struktur des Schüttguts sowie die Heterogenität des Kraftnetzwerks [217, 208]. Gängige Gleitreibungskoeffizienten liegen zwischen $0.1 \leq \mu \leq 0.5$, weshalb wir für die nachfolgende Studie $\mu = 0.4$ setzten. Um den zusätzlichen Einfluss der Rollreibung zu evaluieren, variieren wir μ_r zwischen Null und Eins. Auch wenn Rollreibung zunehmend das Abrollen von Partikeln in Kontakt verhindert und somit die Struktur (Packungsdichte & Koordinationszahl) beeinflusst wird, ändern sich sowohl die Varianz von $\dot{\Gamma}_{\alpha\beta}$, als auch die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung scheraktiver Bereiche wenig mit μ_r (Abb. 4.13).

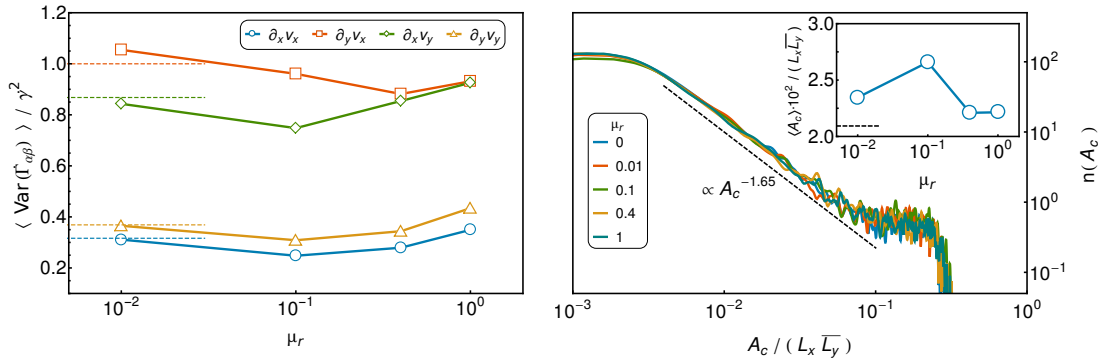


Abbildung 4.13.: Einfluss der Rollreibung auf die Varianz der Scherrate (links) und Anzahlverteilung der Flächen (rechts).

4.5. Einfluss der Kohäsion

Für Partikelgrößen im Mikrometerbereich ist die van-der-Waals-Kraft in der Kontaktmechanik nicht vernachlässigbar [218, 137]. Aber auch größere Partikel können, z.B. durch Flüssigkeitsbrücken, eine attraktive Wechselwirkung erfahren [9]. Adhäsionskräfte zwischen Partikeln ändern Konsolidierungsverhalten [150, 174], Fließeigenschaften [219, 220] und Struktur [151, 126] des Haufwerks. Beispiele dafür sind die zunehmende Porosität [18] und Zugfestigkeit [73] mit steigender Adhäsionskraft. Wie groß der Einfluss der Adhäsionskräfte ist, hängt vom externen Druck ab. Das Verhältnis aus beiden, die sog. Kohäsionszahl η (siehe Gl. (4.20)), liefert ein geeignetes Maß zur Quantifizierung dieses Einflusses [162, 166]. Im Alltag werden die Besonderheiten kohäsiver granularer Materie beim Umfüllen von Pulvern, wie z.B. Mehl oder fein gemahlenem Kaffee sichtbar. Im Gegensatz zu kohäsionslosen Schüttgütern beobachtet man die Ausbildungen von Rissen und eine kohärente Bewegung in Klumpen [17]. Viele Studien der letzten zwanzig Jahre untersuchten diese kohärente Bewegung [23, 186, 64]. Dabei ist jedoch nicht abschließend geklärt, ob Adhäsionskräfte allein eine charakteristische Clustergröße definieren [64], diese durch die Anfangskonfiguration (fraktale Aggregate) vorgegeben ist [24, 186, 19] oder eher durch die mechanische Beanspruchung bestimmt wird [25, 221].

Auch wenn sich, wie im kohäsionslosen Fall, scherratenabhängige Regime identifizieren lassen [222, 223], betrachten wir ausschließlich quasistatische Scherung. Ist es im quasistatischen Grenzfall überhaupt noch möglich, adhäsionskraftbedingte Cluster im verkeilten Haufwerk (dem „Cluster“ nach Campbell [165]) zu identifizieren? Wenn ja, besitzen solche Cluster eine fraktale Dimension, und wird diese durch die Anfangskonfiguration bestimmt? Die Beantwortung dieser Fragen bedingt eine detaillierte Analyse der Struktur, welche im Hinblick auf die extensive Literatur über kohäsive Schüttgüter [125, 222–226] überflüssig scheinen mag, jedoch dabei hilft das benutzte Modell in die bestehende Literatur einzuordnen. Darüber hinaus wird der Einfluss von Adhäsionskräften auf Fluktuationen des Scherratenfeldes, die periodische Rotation des Systems sowie haufwerkinhärente Zeitskalen untersucht. Für die nachfolgende Analyse wird die Kohäsionszahl η bei fester Partikelanzahl ($N = 6000$) und konstanten Reibungskoeffizienten ($\mu = 0.5$, $\mu_r = 0.1$) variiert. Wir betrachten den stationären Zustand quasistatischer Scherung ($\dot{\gamma} = 5 \cdot 10^{-4}$) und mitteln die Ergebnisse über Zeitintervalle $\dot{\gamma}\Delta t > 10$. Mit dem Verhalten kohäsiver granularer Materie vertraute Leser wird auch die Zusammenfassung und Diskussion am Ende des Abschnitts genügen.

Der Einfluss der Kohäsion auf die mechanischen Eigenschaften des Schüttguts wird mit Hilfe des Spannungstensors (Gl. (2.18)) charakterisiert. Wir extrahieren Kompressions- σ und Schubspannung τ aus den Eigenwerten $\sigma_1 > \sigma_2$ gemäß

$$\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \quad \text{und} \quad \tau = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2) \quad , \quad (4.32)$$

siehe Abb. 4.14, links. Darin zeigt φ den Winkel¹ zwischen dem zu σ_1 gehörigen Ei-

¹Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Kontakttrichtung ist die Kontaktverteilung π -symmetrisch, weshalb nur Winkel zwischen Null und π angegeben.

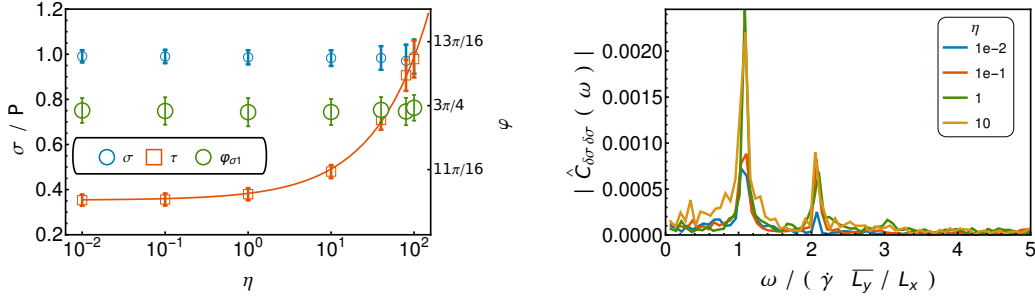


Abbildung 4.14.: Einfluss der Kohäsion auf den Spannungstensor (links) und Fouriertransformierte der Autokorrelationsfunktion der Spannungsfuktuationen (rechts). Fehlerbalken im linken Graphen entsprechen der Standardabweichung.

genvektor und der Scherrichtung x an. Kompressionsspannung ($\sigma \approx P$) und Orientierung der Hauptachsen ($\varphi \approx 3\pi/4 \pm 0.02$) sind unabhängig von der Kohäsion. Da σ_{yy} konstant gehalten wird, folgt aus $\sigma \approx P$, dass $\sigma_{xx}/\sigma_{yy} \approx 1 \neq f(\eta)$, wie auch für den kohäsionslosen Fall berichtet [62]. Es handelt sich somit um ein isotropes Material [73, 227]. Wie zu erwarten ist im stationären Zustand die Koaxialität zwischen Spannung- und Deformationsratentensor gegeben. Ab $\eta \approx 1$ steigt die Schubspannung und damit der makroskopische Reibungskoeffizient deutlich. Die Messwerte können durch

$$\tau(\eta) \approx \tau(0) + 0.03 \eta^{0.66} \quad , \quad (4.33)$$

approximiert werden, wobei $\tau(0) \approx 0.3535$ dem kohäsionslosen Grenzfall entspricht. Gl. (4.33) gibt die Schubspannung in Einheiten der Normalspannung P an. Das Verhältnis aus Schubspannung und Normalspannung definiert den makroskopischen Reibungskoeffizienten. Dieser besteht nach Gl. (4.33) im stationären Zustand aus einem konstanten und einem η -abhängigen Term. Da $\eta \propto F_c/P$ bedeutet dies, dass bei konstanter Adhäsionskraft der makroskopische Reibungskoeffizient kohäsiver Schüttgüter im stationären Zustands mit $(1/P)^{0.66}$ abnimmt, eine wichtige Erkenntnis für Kap. 5. In der Literatur wird der Exponent aus Gleichung (4.33) mit Eins abgeschätzt [64, 215, 114]. Die hier beobachtete Abweichung kann auf einen η -abhängigen Spannungsabfall während der Rotation des Systems zurückgeführt werden. Im Regime großer Adhäsionskräfte ($\eta > 1$) können Minima im zeitlichen Verlauf von σ_{xx} und σ_{xy} gemessen werden (nicht dargestellt), deren Größe mit zunehmendem η steigt. Dass diese Spannungsabfälle durch die Rotation induziert werden, verdeutlicht die Fouriertransformierte der Autokorrelationsfunktion relativer Spannungsfuktuationen

$$C_{\delta\sigma\delta\sigma}(\Delta t) = \frac{1}{T \bar{\sigma}^2} \int_0^T (\sigma(t) - \bar{\sigma}) (\sigma(t + \Delta t) - \bar{\sigma}) dt \quad , \quad (4.34)$$

siehe Abb. 4.14, rechts. Peaks bei $\omega = \dot{\gamma} \bar{L}_y / L_x$ zeigen die Korrelation zu den Rotationsereignissen, dabei steigt die Magnitude mit η . Der Spannungsabfall ist plausibel, da Rotation keine Verzerrung bewirkt. Aufgrund der periodischen Randbedingungen in Scherrichtung gibt es jedoch stets einen Bereich endlicher Verzerrung ($\dot{\Gamma}_{xy}$) zwischen den Wirbelzentren. Dass der absolute Spannungsabfall bei Rotation mit η zunimmt, ist ein Indiz für zunehmend kohärente Bewegung.

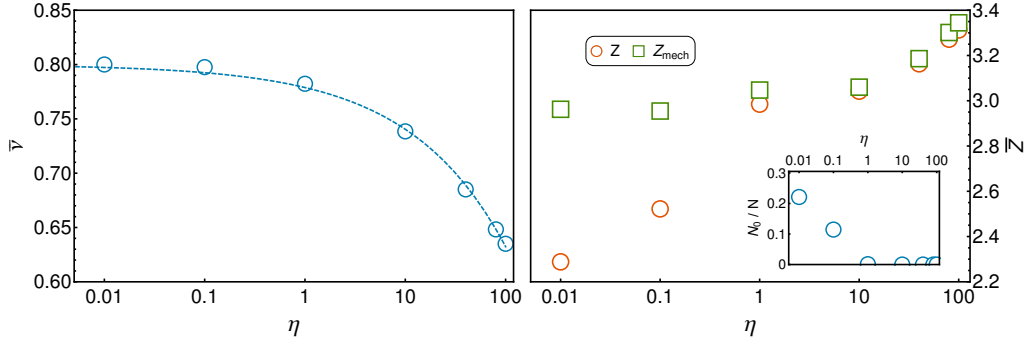


Abbildung 4.15.: Einfluss der Kohäsion auf die Packungsdichte (links) und die Koordinationszahl (rechts). Der Inset des rechten Graphen zeigt die relativen Anteil an Rattlern.

Es ist bekannt, dass Adhäsionskräfte, gerade in Kombination mit Kontaktdrehmomenten, poröse Packungen stabilisieren [150, 228]. Auch im hier betrachteten Modell sinkt die Dichte des stationären Zustands mit steigendem η (Abb. 4.15, links). Dabei folgt die Packungsdichte näherungsweise

$$\nu(\eta) \approx \nu(0) - 0.021 \cdot \eta^{0.45} , \quad (4.35)$$

mit $\nu(0) \approx 0.8$ für den kohäsionslosen Grenzfall. Trotz sinkender Packungsdichte steigt die Koordinationszahl mit zunehmendem η (Abb. 4.15, rechts). Während die Anzahl der Partikel ohne Kontakt (N_0) für steigendes η gegen Null geht (siehe Inset), erhöht sich die mechanische Koordinationszahl erst für $\eta > 1$ merklich. Diese Antikorrelation zwischen Packungsdichte (sinkend) und Koordinationszahl (steigend) wird in der Literatur als Indiz für die Agglomeration von Partikeln in Clustern gewertet [64, 19]. Beide Messgrößen können jedoch unabhängig voneinander sein, wie im kohäsionslosen Fall gezeigt wurde [229].

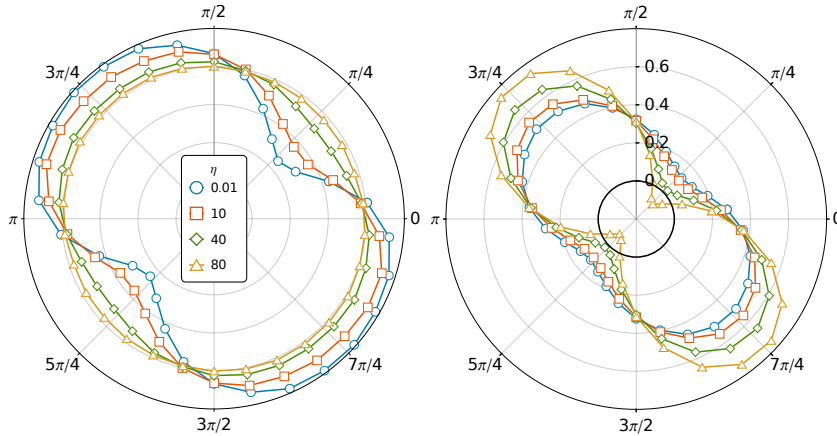


Abbildung 4.16.: Polardiagramme zum Einfluss der Kohäsion auf die Kontaktverteilung (links) und die mit Normalkräften gewichtete Kontaktverteilung (rechts).

Näheren Einblick in die Struktur gewährt die Kontaktverteilung (Abb. 4.16, links), welche durch eine Fourierreihe nach Gl. (2.22) angenähert wird [54, 119]. Der Betrag der Koeffizienten A_k dient als Anisotropiemaß (Abb. 4.17, links). Mit steigender

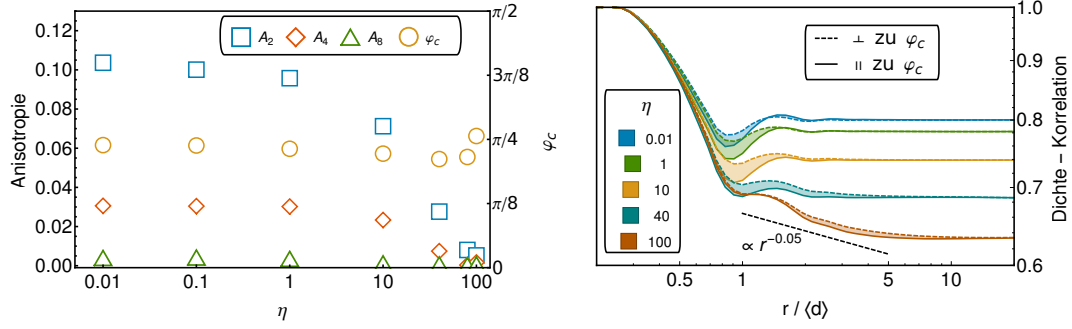


Abbildung 4.17.: Einfluss der Kohäsion auf die Kontaktanisotropie (links) und die Dichtekorrelation (rechts).

Adhäsionskraft wird das Kontaktnetzwerk isotrop. Abb. 4.17 bestätigt, dass nur die ersten beiden Ordnungen von Gl. (2.22) zu berücksichtigen sind. Die Nicht-Koaxialität zwischen Spannungs- und Fabrictensor [121] (siehe φ_c) ist nicht wesentlich. Es sei angemerkt, dass die Bestimmung der Hauptachse für große Adhäsionskräfte ($\eta > 10$) aufgrund verschwindender Anisotropie nicht aussagekräftig ist. Gewichtet man die Kontaktverteilung mit der in der jeweiligen Raumrichtung auftretenden mittleren Normalkraft, zeichnet sich ein konträres Bild ab (Abb. 4.16, rechts): Mit zunehmender Kohäsion steigt die „Kraftanisotropie“. Während Druckkräfte in der Richtung $\varphi \approx 3\pi/4$ wirken, findet man zunehmend zugbelastete Kontakte ($F_n < 0$) senkrecht dazu. Dieses Ergebnis ist im Einklang mit [64].

In einem Bereich $r > 2$ bildet sich eine Anisotropie aus, welche mit Hilfe der Dichtekorrelationsfunktion offenbart werden kann [122]. Dazu werten wir Gl. (2.23) für Kreissegmente mit Öffnungswinkel $\pi/2$ um die Anisotropieachse ($\varphi_c \approx \pi/4$) der Kontaktverteilung aus und unterteilen somit den Kreis mit Radius r um ein Partikelzentrum in vier gleichgroße Segmente: zwei in φ_c -Richtung, zwei senkrecht dazu. Die gemessenen Korrelationsfunktionen (Abb. 4.17, rechts) lassen sich grob in drei Abstandsregime unterteilen. Der Bereich $r \leq 1$ beschreibt die unmittelbare Umgebung (das „Nahfeld“) und wird durch die Kontaktanisotropie und die Polydispersität des Systems bestimmt [175]. Im „Fernfeld“ ($r \gg 1$) entspricht die Dichte-Korrelation der mittleren Packungsdichte, unabhängig von der Orientierung. Der interessante Bereich liegt zwischen diesen Regimen. Hier entsteht eine mit η steigende Anisotropie, wobei die Packungsdichte senkrecht zu φ_c , also in Richtung der Längsachsen der Keulen in Abb. 4.16, größer ist. Des Weiteren steigt die räumliche Ausdehnung dieses anisotropen Bereiches mit η und definiert eine Längenskala jenseits des Partikeldurchmesser, die als Clustergröße gewertet werden kann (siehe dazu auch [122, 123]). Ein fraktale Substruktur (wie in [230, 186]) ist jedoch allein für die größte betrachtete Kohäsionszahl ($\eta \approx 100$) zu erahnen. Gilabert et al. [126, 19] untersuchten das Konsolidierungsverhalten kohäsiver Pulver mit Simulationen und kamen für die Ausdehnung einer solchen Substruktur zu ähnlichem Ergebnis ($\approx 10 \langle d \rangle$ für $\eta = 100$). Auch wenn die Quantifizierung einer fraktalen Di-

mension für solche Längenskalen² in Frage gestellt werden kann, ist die Konfiguration hier deutlich kompakter: $d_f \approx 1.95$ im Vergleich zu $d_f \approx 1.55$ in [19]. Neben dem unterschiedlichen Belastungsmodus (Scherung statt Kompression) könnte dies auf die kleinere Rollreibung ($\mu_r \approx 0.5$ in [19]) zurückzuführen sein. Im Gegensatz zu den experimentellen [24, 186] und numerischen Studien [126, 19] unterscheidet sich die fraktale Dimension jedoch deutlich von der Anfangskonfiguration ($d_f^{(2D)} \approx 1.4$, siehe Kap. 3). Bereits Eggersdorfer et al. [231] berichteten von einer Restrukturierung fraktaler Agglomerate unter Scherung, allerdings für deutlich geringere Packungsdichten. Es liegt der Schluss nahe, dass die fraktale Dimension im hier beobachteten stationären Fließzustand nicht präparationsbedingt ist.

Auch der Porenraum birgt Hinweise auf eine fraktale Substruktur [19]. Eine Analyse des Porenraums kann auf Basis einer Raumzerlegung durchgeführt werden. Für polydisperse Kugelpackungen bietet sich hier die *radical-Zerlegung* an, die der Konstruktion des Voroni-Graphen ähnelt, allerdings unter Verwendung eines anderen Maßes [232]. Während die Kanten des Voroni-Graph eines polydispersen Systems gekrümmt sind [233], ergibt die radical-Zerlegung Kanten ohne Krümmung, welche durch den Porenraum verlaufen und höchstens an Kontaktpunkten Partikel schneiden. Unter Verwendung des Kontaktnetzwerkes kann der so konstruierte Graph des Porenraums in Untergraphen zerlegt werden, die einzelne Poren beschreiben. Die den Knoten der Untergraphen zugeordneten Flächen summieren sich nach Abzug der zu berücksichtigenden Partikelflächensegmente zu der Porenfläche [234]. Die WDV der Porenflächen ist für alle $\eta < 80$ exponentiell (nicht dargestellt), wobei die mittlere Porenfläche erst für $\eta > 10$ merklich steigt ($\approx \langle d \rangle^2$ für $\eta \leq 10$). Diese Beobachtung ist im Einklang mit [64]. Für große Adhäsionskräfte ($\eta \geq 80$) weicht die Verteilung vom exponentiellen Verlauf ab. In diesem Bereich beeinflusst die fraktale Substruktur zunehmend die Porenverteilung und wandelt diese in ein Potenzgesetz ab.

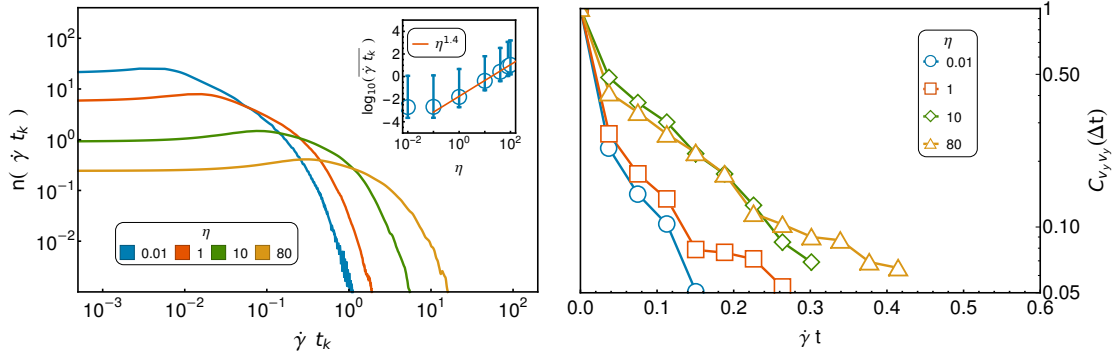


Abbildung 4.18.: WDV der Kontaktzeiten (links) und Autokorrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen v_y (rechts).

Steigende Adhäsionskraft erhöht die Zugbelastbarkeit der Kontakte und damit auch die Kontaktzeit von Partikeln im Haufwerk [235], wie Abb. 4.18 (links) demonstriert. Dargestellt sind WDVen der Kontaktzeiten zu einem bestimmten Zeitpunkt. Aufgrund des

²Skaleninvarianz ist bei weniger als einer Größenordnung zwischen Partikeldurchmesser und Clustergröße sicherlich nicht gegeben.

stationären Zustands ist zu erwarten, dass diese der Kontaktlebensdauer entsprechen. Die leichte Erhöhung der WDVen vor dem exponentiellen Abfall ist ein Artefakt der Kurvenglättung und nicht die Kollisionszeit wie in [236]. Der Mittelwert der Kontaktzeit steigt dabei wie $\bar{\gamma} \bar{t}_k \propto \eta^{1.4}$ (siehe Inset) und erreicht für $\eta \approx 40$ den Wert Eins. Höhere Adhäsionskräfte führen zu einer mittleren Kontaktzeit, welche die scherungsinduzierte Zeitskala ($\dot{\gamma}^{-1}$) übersteigt. Rognon et al. [64] werten dieses Ergebnis als Indikator für Partikelagglomeration. Es sei jedoch angemerkt, dass der Abfall der Kontaktzeitverteilung auch für $\eta = 100$ exponentiell ist. Es gibt folglich keinen Kontakt, der über die gesamte Zeit der Scherung erhalten bleibt. Cluster bzw. Agglomerate haben eine endliche Lebensdauer. Aufschluss darüber kann die Autokorrelationszeit (Abb. 4.18, rechts) geben, d.h. die zeitliche Korrelationsfunktion der Fluktuationen von v_y . Im Rahmen der Messgenauigkeit kann ein exponentieller Abfall für alle η beobachtet werden, wobei die charakteristische Zeit mit zunehmender Adhäsionskraft steigt. Die Autokorrelationszeiten ($\leq 0.2 \dot{\gamma}^{-1}$) sind jedoch klein im Vergleich zur Simulationszeit.

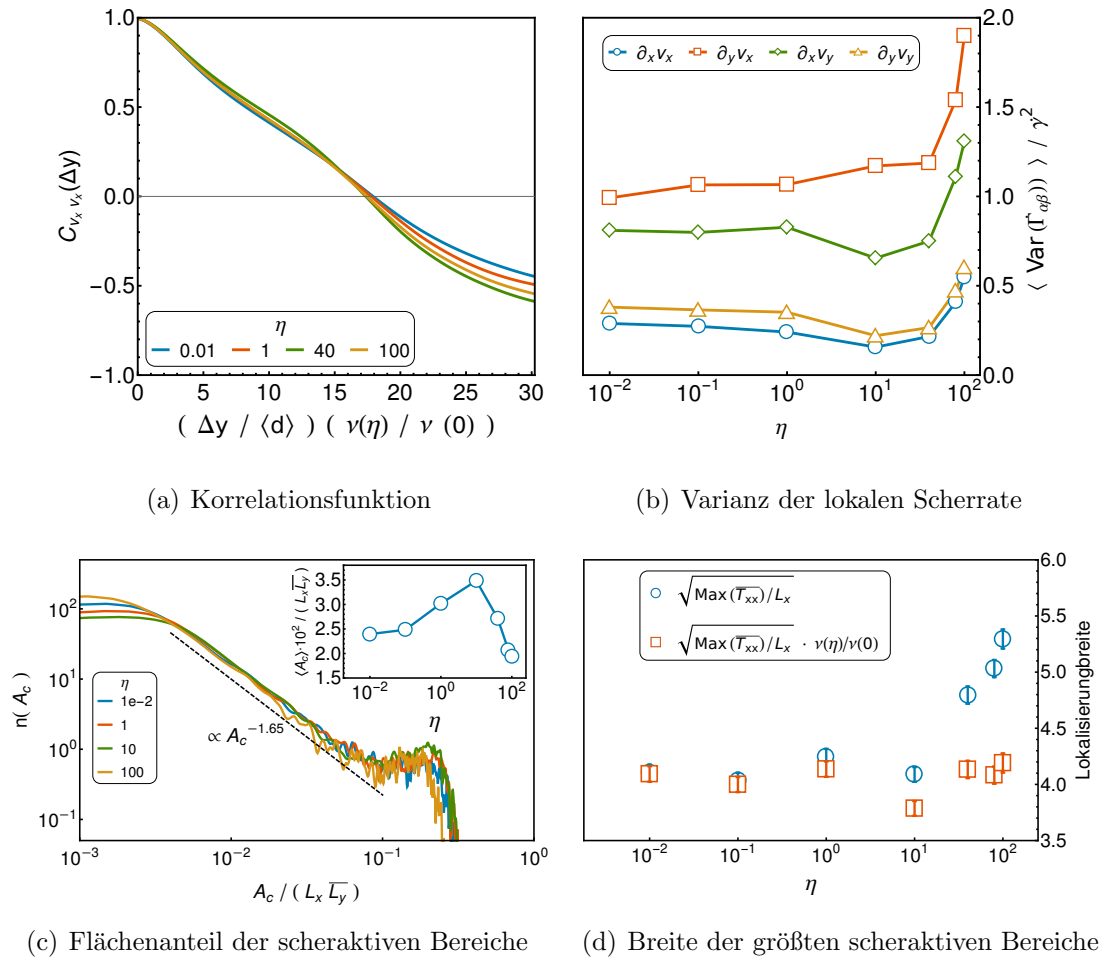


Abbildung 4.19.: Reskalierte Korrelationsfunktion der Fluktuationen von v_x in y -Richtung (a); Varianz der lokalen Scherrate als Funktion der Kohäsionszahl (b); Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Flächenanteile der scheraktiven Bereiche (c); Wurzel aus der mittleren xx -Trägheitstensorkomponente als Maß für die Breite scheraktiver Zonen (d).

Im Gegensatz zur Dichte-Korrelationsfunktion kann die Korrelationsfunktion der Ge-

schwindigkeitsfluktuationen keine Hinweise auf eine charakteristische Clustergröße liefern (entgegen [64]), da die zugehörige Korrelationslänge im quasistatischen Grenzfall die Systemgröße übersteigt (Abs. 4.3). Die η -Abhängigkeit der Korrelationsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen lässt sich auf die Änderung der Packungsdichte und damit Systemhöhe ($L_y \propto 1/\nu$) zurückführen: Reskaliert man die Abszisse mit $\nu(\eta)/\nu(0)$, kollabieren die Funktionen weitestgehend (siehe Abb. 4.19(a)).

Die Interpretation des Einfluss von Adhäsionskräften auf die Varianz der lokalen Scherrate ist etwas diffiziler (Abb. 4.19(b)). Es lassen sich zwei Regime identifizieren: Im Bereich $\eta < 10$ sinkt $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{\alpha\beta})$, bis auf die yx -Komponente. Wir interpretieren dieses Verhalten als Konsequenz der zunehmend kohärenten Bewegung. Lose Partikel werden ins Kontaktnetzwerk integriert, und die Fluktuationen der Scherrate nehmen ab. Diese Kohärenz verstärkt die Abweichung von einem linearen Scherprofil, d.h. $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})$ steigt leicht. Im Regime $\eta \geq 10$ wächst $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{\alpha\beta})$ für alle $(\alpha\beta)$ deutlich mit η . Die strukturellen Änderungen des Schüttguts, vor allem die Erhöhung der Porosität, fördern Fluktuationen in der Scherrate. Entstehender Porenraum kann für lokale elastische oder plastische Deformation genutzt werden.

Näheren Einblick liefert die Analyse der Form und Verteilung von Bereichen großer Scheraktivität. Dazu wird die Methodik aus Abschnitt 4.4 angewandt. Das Feld der lokalen Scherrate $\dot{\Gamma}_{yx}$ wird auf Quadratgitterplätzen (Gitterkonstante $\langle d \rangle$) ausgewertet und mit Schwellwert $\text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})^{1/2}$ binarisiert. Resultierende, zusammenhängende Teilbereiche stellen die positiven Ausläufer der Verteilung $n(\dot{\Gamma}_{yx})$ dar. Die Flächenverteilungen dieser Extrema sind in Abb. 4.19(c) dargestellt. Interessant ist hier vor allem der Bereich $A_c/(L_x \overline{L_y}) \leq 3 \cdot 10^{-3}$. Die Abnahme der Anzahl kleiner Flächen ($\eta \leq 10$), lässt auf die zunehmend kohärente Bewegung schließen. Dass sich dieser Trend für größere Adhäsionskräfte umkehrt, bestätigt die Bedeutung der entstehenden Poren für kleine, lokale Deformationen. Im Gegensatz zum mikroskopischen Reibungskoeffizienten sind für alle η Bereiche der Größe $\approx L_x L_y / 10$ zu finden, die scherbandähnlichen Lokalisierungszonen entsprechen könnten. Es ist bekannt, dass die Scherzonenbreite mit steigender Adhäsionskraft zunimmt [237, 117]. Aus Mangel an stationären Scherbändern soll hier daher die Breite der Bereiche $A_c \geq L_x L_y / 10$ quantifiziert werden. Zu diesem Zweck bestimmen wir den Trägheitstensor

$$T_{\alpha\beta} = \sum_i m_i (x_{i\kappa} x_{i\kappa} \delta_{\alpha\beta} - x_{i\alpha} x_{i\beta}) \quad (4.36)$$

der einzelnen Flächen, wobei die Summe über alle Gitterplätze des betrachteten Bereichs geht. Als m_i nutzen wir die Fläche der Gitterplätze ($\langle d \rangle^2$). In Abb. 4.19(d) ist die Wurzel aus dem Quotienten der mittleren xx -Komponente des Trägheitstensors und der Systembreite L_x dargestellt. Die vertikale Ausdehnung dieser Bereiche steigt signifikant ab $\eta \geq 10$. Dabei ist die Zunahme der Breite direkt proportional zu L_y . Reskalierung durch $\nu(\eta)/\nu(0)$ führt zu einer konstanten Breite (orange Symbole). Das bedeutet, dass der Massenanteil dieser scheraktiven Bereiche unabhängig von der Kohäsionszahl ist und allein die steigende Porosität zur Verbreiterung führt.

Zusammenfassung und Diskussion: Die Analysen in diesem Abschnitt zeigen, dass die von dem Modell produzierten Ergebnisse weitestgehend im Einklang mit der Literatur sind. Adhäsionskräfte fördern die kohärente Bewegung der Partikel und haben ab $\eta \geq 10$ massiven Einfluss auf mechanische und strukturelle Eigenschaften des Schüttguts. Cluster aus agglomerierten Partikeln übernehmen die Rolle einzelner Partikel bei der Deformation des Schüttguts. Die Quantifizierung einer charakteristischen Clustergröße im quasistatischen Grenzfall ist schwierig. Die Korrelationsfunktion von Geschwindigkeitsfluktuationen ist ungeeignet, da die Bewegung des gesamten Systems korreliert ist. Lediglich die Dichte-Korrelationsfunktion zeigt eine adhäsionskraftabhängige Längenskala jenseits des Partikeldurchmessers, auf welcher sich eine Anisotropie ausbreitet. Hohe Adhäsionskräfte lassen eine fraktale Substruktur erahnen, die jedoch mit $d_f \approx 1.95$ relativ kompakt ist. In Kombination mit der Analyse der Kontakt- sowie Autokorrelationszeit zeichnet sich folgendes Bild ab: Die Bewegung des Haufwerks wird durch kurzlebige Cluster bestimmt, die nicht fraktalen Aggregaten der Anfangskonfiguration entsprechen. Unterschiede der fraktalen Dimension zu Studien zum Konsolidierungsverhalten [126, 19] sind wahrscheinlich auch auf den Einfluss von Kontaktdrehmomenten zurückzuführen. Kontaktdrehmomente stabilisieren Kraftketten [238] und ändern beim Konsolidierungsverhalten sowohl Plastizitätsindex [19] als auch die asymptotische Porosität [151]. Ausreichend hohe Rollreibung verhindert sogar die Agglomeration der Partikel und fördert eine eher kettenähnliche Haufwerkstruktur [19], die das mechanische Verhalten dominiert. Dies trifft für den hier gewählten Rollreibungskoeffizient nicht zu.

Auch mit Adhäsionskräften können im Deformationsfeld mit Lees-Edwards-Randbedingungen keine stationären Scherbänder beobachtet werden. Dennoch unterscheiden sich Fluktuationen der lokalen Scherrate kohäsiver granularer Materie von der kohäsionsloser. Der entstehende Porenraum ermöglicht das vermehrte Auftreten räumlich kleiner Deformationsereignisse. Die Breite der größten scheraktiven Bereiche senkrecht zur Scherrichtung steigt ab $\eta > 10$. Ähnliches Verhalten wurde für die Breite stationärer Scherbänder berichtet [117, 237]. Hier ist die Verbreiterung jedoch proportional zur kohäsionsbedingten Änderung der Packungsdichte.

4.6. Zeitverfestigung

Aufgrund der Relevanz von Zeitverfestigung für die Bodenmechanik bildet die Untersuchung des Bruchverhaltens zementierter Proben, d.h. kleine Verzerrungen und irreversibler Haftkraftverlust, einen Schwerpunkt der Literatur. Sofern keine natürlich zementierten Bodenproben vermessen werden, kann im Labor eine Verfestigung durch Zugabe einer bestimmten Zementmenge (i.d.R. $< 5\%$ der Probenmasse) erzielt werden (siehe z.B. [41]). Abhängig vom hydrostatischen Druck und Zementgehalt kann unterschiedliches Bruchverhalten beobachtet werden: Bei kleinen Spannungen und starker Zementierung reagiert das Material eher spröde, während bei großen Spannungen und schwacher Zementierung duktiler Verhalten beobachtet wird [40, 239, 240]. Ergänzt werden diese experimentellen Studien durch numerische Arbeiten, in denen unterschiedliche Modellierungsansätze für Zementierung zu finden sind. Feststoffbrücken zwischen den Partikeln die parallel zur regulären Kontaktmechanik geschaltet werden [241] oder diese vollständig ersetzen [128, 242], Modellierung des Zement als weitere Partikel-sorte [43, 44] oder Darstellung der Zementmatrix durch ein Gitter [243]. Essentieller Bestandteil der Modellierung zementierter Kontakte ist jedoch stets die Formulierung eines Kriteriums für das Kontaktversagen [244, 241]. Dazu wird ein normal- und adhäsionskraftabhängiger Schwellwert für Zug- und Scherkräfte sowie Drehmomente definiert, wie auch im hier verwendeten Modell (siehe Abs. 4.1.1).

Die Erkenntnisse aus den experimentellen und numerischen Studien lassen sich auf Basis einer Dissipationsbilanz nach Taylor [245] wie folgt kondensieren: Die maximale Schubspannung τ_{fail} wird durch drei Beiträge bestimmt [246], die Arbeit zum Aufbrechen zementierter Kontakte, die innere Reibung des Haufwerks sowie Dilatanz. Vor allem Dilatanz ist extrem präparationsabhängig [207] und die maximale Dilatanz muss aufgrund der Bruchdynamik zementierter Kontakte nicht gleichzeitig mit dem Schubspannungsmaximum auftreten [247, 44]. Gelegentlich werden die (selbsterklärenden) Präparationsprotokolle *cementation before load* und *load before cementation* unterschieden [240]. Im letzteren Fall speichert die Zementierung elastische Energie in den Kontakten, die beim Aufbruch frei wird und so das Bruchverhalten beeinflusst. Dilatanz beim Sprödebruch zementierter Proben wird auf restzementierte Bruchstücke zurückgeführt [241]. Neben Zementierung kann jedoch auch eine überkonsolidierte Anfangskonfiguration Dilatanz verursachen. Es ist schwierig, beide Effekte experimentell voneinander zu trennen, und deshalb ratsam, eine sehr lockere Anfangskonfiguration zu verwenden [44]. Interpretiert man die Ergebnisse im Rahmen einer Mohr-Coulomb-Theorie, herrscht Einigkeit darüber, dass die makroskopische Kohäsion mit Zementgehalt bzw. Adhäsionskraftstärke zunimmt [41, 42, 207, 248]. Kontrovers wird jedoch diskutiert, ob die Zementierung auch Auswirkung auf die innere Reibung hat [44, 42].

In einer numerischen Studie zum Einfluss mikroskopischer Parameter auf das makroskopische Fließverhalten zementierter Proben behandelten Taboada et al. [207] unter anderem diese Thematik. Die Simulationsergebnisse biaxialer Scherung mit der Kontaktdynamik-Methode konnten gut mit einem Mohr-Coulomb-Modell beschrieben werden, wobei die innere Reibung unabhängig von der Zementierungsstärke ist und

die makroskopische Kohäsion linear mit dem Zementgehalt steigt. Als Anfangskonfiguration dieser 2D Untersuchung wurde eine dichte Packung ($\nu = 0.84$) benutzt. In einer weiteren Studie [248] wurde der Einfluss der Anfangskonfiguration behandelt, indem isotrope Packungen unterschiedlicher Dichte mit fester Adhäsionskraft untersucht wurden. Dabei nutzten Estrada & Taboada die verschiedenen Deformationsmoden des Biaxialtester (von isotroper Kompression zu volumenerhalterner Scherung), um die Fließgrenze zementierter Proben genauer abzutasten. Die Fließgrenze konnte mit einer Ellipse modelliert werden, wobei das Seitenverhältnis und der hydrostatische Druck, welcher den Mittelpunkt definiert, mit steigender Packungsdichte zunehmen. Für dichte Packungen ($\nu > 0.75$) entartet die Ellipse zu einer Mohr-Coulomb ähnlichen Parabel. Ein weiteres interessantes Ergebnis dieser Studie betrifft die Kontinuumsmodellierung zementierter granularer Materie mit assoziierten Fließkriterien [249, 250], denn es wurde gezeigt, dass nur für kleine Packungsdichten der Deformationsvektor normal zur Fließgrenze ist (Prinzip der Normalität).

In den meisten Szenarien verhalten sich zementierte Proben mechanisch entfestigend, d.h. mit andauernder mechanischer Belastung nimmt die Viskosität ($\tau/\dot{\gamma}$) ab, ähnlich thixotropem Verhalten. Kontrovers wird jedoch der stationäre Fließzustand, also der Zustand bei großen Verzerrungen, diskutiert. Aufgrund von Scherlokalisierung bzw. dem Bruch zementierter Proben, können konventionelle Triaxialversuche³ die Verzerrung nicht mehr korrekt aufnehmen und damit keine kritische Zustandslinie messen [42]. Während mehrere Studien zu dem Ergebnis kommen, dass die Zementierung bei großen Verzerrungen keinen Einfluss mehr auf das mechanische Verhalten des Materials hat [41, 42, 207], zeigt eine kombinierte Studie aus Experimenten und DEM-Simulationen von Wang & Leung [43, 44] Gegenteiliges. Hier bestimmen restzementierte Bruchstücke in Scherzonen das mechanische Verhalten bei großen Verzerrungen. Im Experiment wird hingegen der stationäre Zustand nicht ganz erreicht und gemutmaß, dass Rückstände der Zementierung auf der Partikeloberfläche das Fließverhalten bei großen Verzerrungen beeinflussen. Jüngere DEM-Studien bestätigten eine Scherlokalisierung in zementierten Proben [128, 241], allerdings werden zementierte Kontakte innerhalb der Scherzonen vollständig aufgebrochen. Des Weiteren messen Estrada et al. [128] eine Zunahme der Scherbandbreite mit steigender Normalspannung, betrachten jedoch nur einen Zeitpunkt nach $\dot{\gamma} t \approx 2$. Unklar ist, ob es sich wirklich um eine stationäre Scherbandbreite handelt.

Die planare Scherung mit periodischen Randbedingungen in Scherrichtung ermöglicht beliebig große Scherwege. Für das hier untersuchte Modell wird geklärt, inwiefern eine Restverbackung erhalten bleibt und sich stabile Scherzonen bilden. Wir beschränken uns jedoch nicht auf den Grenzfall zementierter Proben ($t_c \rightarrow \infty$). Durch Variation von t_c wird auch die Verfestigung von Kontakten während der Simulation betrachtet. Das Verhältnis aus mittlerer Kontaktzeit und t_c gibt an, ob die Scherung eher den adhäsions- oder den zementierungsbestimmten Grenzfall abbildet. Da die mittlere Kontaktzeit bei Scherung durch $\dot{\gamma}$ bestimmt wird, betrachten wir $\dot{\gamma} t_c$ als relevante dimensionslose

³Deformationsgesteuerte Stempel am oberen und unteren Ende einer Gummi-Membran Wand, die von außen mit einer Flüssigkeit zur Drucksteuerung umschlossen wird.

Größe [169]. Entspricht die mittlere Kontaktzeit der Verfestigungszeit ($\dot{\gamma} t_c \approx 1$), ist interessantes Verhalten zu erwarten.

Die ausgeprägte Präparationsabhängigkeit erschwert die Wahl einer adäquaten Anfangskonfiguration. Um Überkonsolidierung und die damit einhergehende Dilatanz zu vermeiden, nutzen wir, inspiriert durch die experimentelle Prozedur zur Untersuchung des Fließverhaltens [75], den kritischen Zustand als Anfangskonfiguration. Dieser ist nur für zeitunabhängige Adhäsionskräfte, also für kohäsive und kohäsionslose Haufwerke, bekannt. Den kritischen Zustand eines kohäsionslosen Systems zu verwenden, entspricht dem üblichen Protokoll zur Untersuchung zementierter Systeme. Durch Abb. 4.15 wissen wir jedoch, dass die Packungsdichte des kritischen Zustands mit steigendem η sinkt und somit die Verfestigung eines ursprünglich kohäsionslosen Schüttguts zu einer überverfestigten Packung im adhäsionsbestimmten Grenzfall führt. Aus diesem Grund wählen wir einen zur Literatur diametralen Ansatz und nutzen den kritischen Zustand des adhäsionsbestimmten Grenzfalls. Auch wenn diese Wahl im Fall endlicher Verfestigungszeit tendenziell unterverfestigt ist, kann nicht ausgeschlossen werden, dass restzementierte Bruchstücke zu einer Volumenzunahme beim Bruch der Probe führen. Um den Einfluss von Adhäsionskräften bei nicht zu großem Dichteunterschied im Vergleich zum kohäsionslosen Fließen sicherzustellen, verwenden wir $\eta^{(\max)} = 10$. Durch Variation der Partikelanzahl bei festgehaltener Systembreite ($L_x = 88$) wird zusätzlich der Einfluss der Systemhöhe überprüft (dabei gilt $L_y/L_x \leq 2.5$, siehe Abs. 4.3). Konfigurationen werden verbacken, indem die Kontaktzeit um $\Delta t_k = 10^{10} \sqrt{\rho \langle d \rangle^2 / P}$ erhöht wird. Zu Beginn der Simulation sind somit alle Kontakte vollständig adhäsiv (es gilt $\Delta t_k \gg \text{Max}(\{t_c\}) \gg T$). Im Gegensatz zur üblichen experimentellen Prozedur ist es in den Simulationen möglich, Kontaktzeiten instantan zu setzen [215]. Aufgrund des quasistatischen Präparationsprozesses wird darauf verzichtet die Probe zur Verbackung zu entlasten. Zur weiteren Analyse wird die Probe bei unveränderter Rate $\dot{\gamma} = 5 \cdot 10^{-5}$ um $\dot{\gamma} \Delta t > 30$ geschert.

4.6.1. Bruchdynamik und stationäres Fließen: Über Dilatanz und Kontraktanz

Für alle untersuchten Systemgrößen und Verfestigungszeiten größer Null steigt die Packungsdichte mit zunehmender Verzerrung und sättigt anschließend (Abb. 4.20, links). Es wird keine Volumenzunahme beobachtet. Auch wenn die Abbildung ein rasches Eintreten des stationären Zustands suggeriert ($\dot{\gamma} t > 3.5$), ist für einzelne Verfestigungszeiten ($\dot{\gamma} t_c \approx 1$) nach einer Scherung um $\dot{\gamma} t = 60$ noch ein leichter Anstieg der Packungsdichte messbar. Darüber hinaus tritt der stationäre Zustand bei höheren Systemen später ein, d.h. die Aufbruchzeit steigt mit L_y . Lediglich für $N \leq 12000$ wird im zementierungsbestimmten Grenzfall ein stationärer Zustand innerhalb $\dot{\gamma} t_c \leq 30$ erreicht. Die Packungsdichte des stationären Zustands für $\dot{\gamma} t_c \gg 1$ entspricht einer kohäsionslosen Packung (Abb. 4.20, rechts), eine Restverbackung ist unwahrscheinlich.

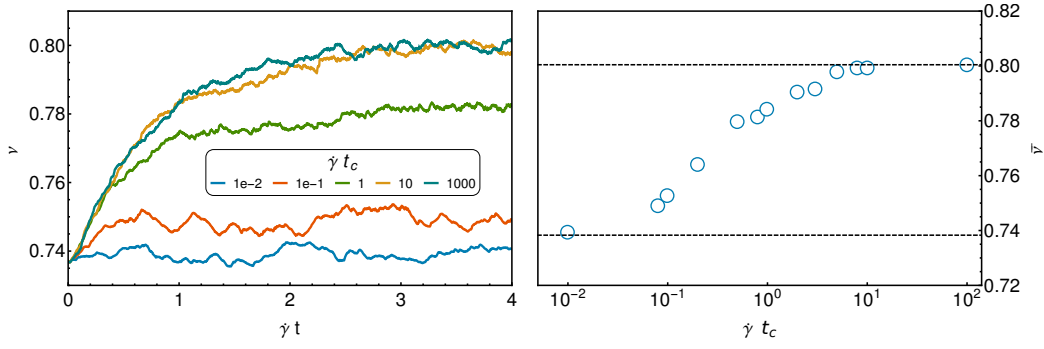


Abbildung 4.20.: Exemplarische Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Packungsdichte für verschiedene Verfestigungszeiten t_c (links) sowie die mittlere Packungsdichte im stationären Zustand in Abhängigkeit der Verfestigungszeit (rechts). Daten für $N = 6000$.

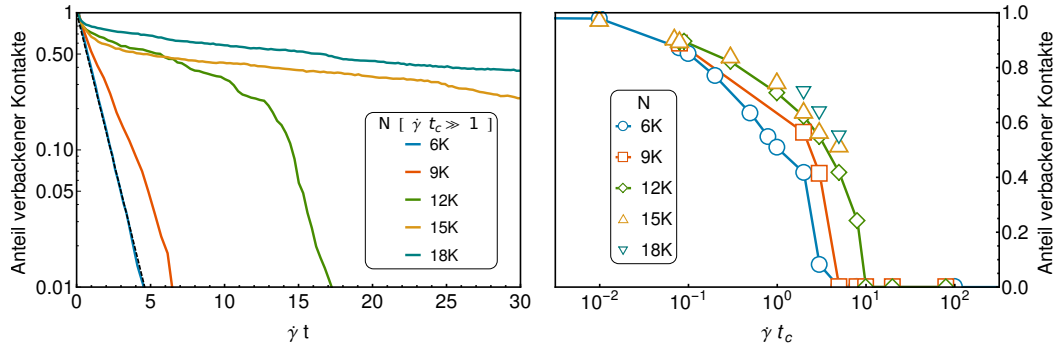


Abbildung 4.21.: Links: Bruchdynamik in Form des Anteils verbackener Kontakte (Kontaktzeit $> t_c$) über γt für verschiedene Systemgrößen und Verfestigungszeiten $t_c \gg 1/\gamma$. Die schwarz gestrichelte Linie markiert $e^{-\gamma t}$. Rechts: Anteil verbackener Kontakte nach Verzerung von $\gamma t \approx 30$.

Ähnlich der Packungsdichte offenbart auch die Bruchdynamik, d.h. die Entwicklung des Anteils verbackener Kontakte Zeitskalen größer γ^{-1} . Dabei werden alle Kontakte als verbacken bezeichnet, deren Kontaktzeit die Verfestigungszeit t_c überschreitet. Für Verfestigungszeiten $\gamma t_c \gg 1$ (zementierender Grenzfall) demonstriert der linke Graph in Abb. 4.21 den Aufbruch unterschiedlicher Systemgrößen. Während kleine Systeme z.T. unter Drehung eine charakteristische Bruchzeit von $1/\gamma$ aufweisen, sind die größten Systeme auch nach $\gamma t \approx 30$ noch zu 40 % verbacken. In Abhängigkeit der Systemhöhe können zwei verschiedene Bruchdynamiken des zementierungsbestimmten Grenzfalls beobachtet werden. Kleinere Systeme brechen homogen während sich bei größeren Systemen ein Riss in x-Richtung bildet, der sich mit zunehmender Scherdeformation verbreitert (siehe Abb. 4.22). Diese Rissverbreiterung geht einher mit dem exponentiellen Abfall zementierter Kontakte und einer charakteristischen Bruchzeit von $\approx 80/\gamma$ für die größten Systeme. Dabei können spontane Drehungen auch zu schnellerem Aufbrechen führen (siehe $N = 12 \cdot 10^3$ in Abb. 4.21 rechts). Unter Berücksichtigung dieser charakteristischen Bruchzeit und der Systeme im stationären Zustand kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass der stationäre Fließzustand im zementierenden Grenzfall dem stationären Fließen einer kohäsionslosen Packung gleicht. Es bleibt keine Restverbackung

erhalten (siehe Abb. 4.21, rechts). Im Grenzfall $t_c \rightarrow 0$ bleiben per Definition alle Kontakte verbacken. Lediglich für Verfestigungszeiten in Größenordnung der inversen Scherrate zeigt sich eine Teilverbackung des Systems, d.h. einige Kontakte erfahren die maximale Adhäsionskraft, während andere keiner Zugbelastung standhalten. Abhängig von der räumlichen Verteilung begünstigt dies Scherheterogenitäten.

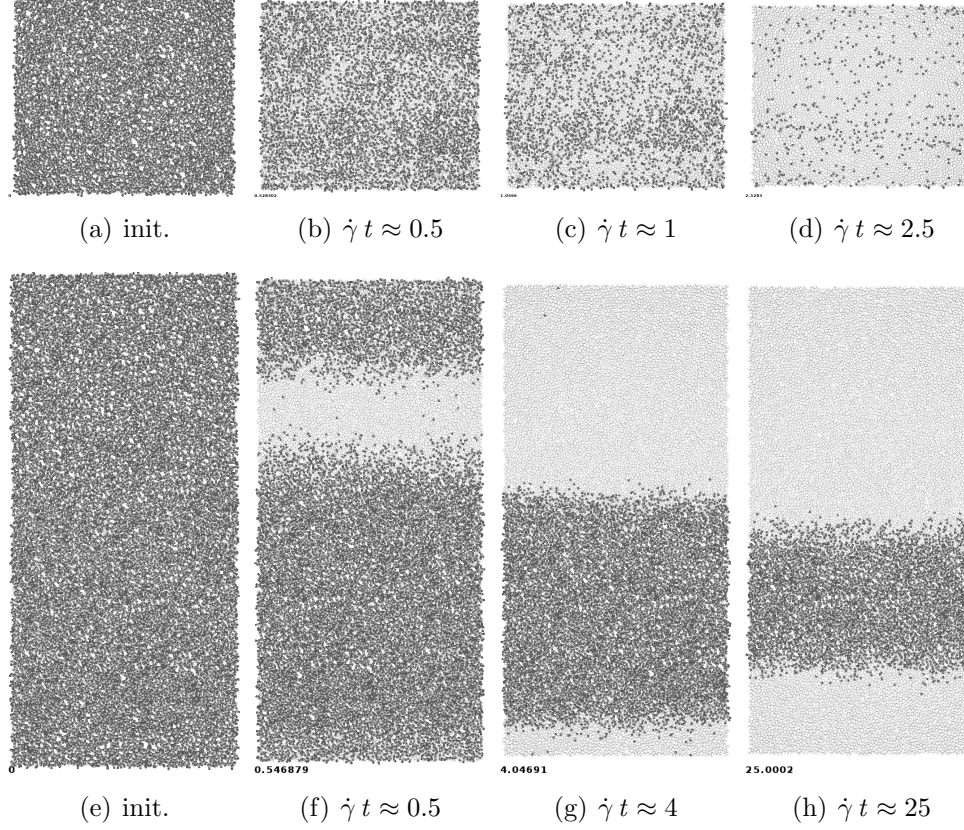


Abbildung 4.22.: *Momentaufnahmen des Kontaktnetzwerks im zementierungsbestimmten Grenzfall für $N = 6000$ (oben) und $N = 15000$ (unten). Partikel sind als hellgraue Kreise, zementierte Kontakte als dunkelgraue Balken dargestellt.*

Die Analyse der Fluktuationen der lokalen Scherrate liefert einen deutlichen Hinweis auf ein inhomogenes Scherprofil (Abb. 4.23). Mit gleicher Methodik wie in den vorherigen Abschnitten wird das Feld der lokalen Scherrate auf einem Quadratgitter mit Gitterkonstante $\langle d \rangle$ ausgewertet (entspricht coarse-graining-Länge). Dargestellt ist die Varianz der lokalen Scherrate (Abb. 4.23, links) sowie die durch Clusteranalyse⁴ gewonnen Größenverteilung scheraktiver Bereiche (Abb. 4.23, rechts). Beide Größen zeigen extremales Verhalten um $\dot{\gamma} t_c \approx 1$: Sowohl die Varianz der lokalen Scherrate, als auch die mittlere Fläche von Bereichen mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})^{1/2}$ zeigen ein Maximum bei $\dot{\gamma} t_c \approx 0.2$. Die WDV scheraktiver Bereiche offenbart, dass die Scherung um $\dot{\gamma} t_c \approx 0.2$ lokalisiert.

Das Scherratenfeld ermöglicht eine genauere Behandlung der Frage nach Dilatanz. Während mit der oben dargestellten Messung festgestellt wurde, dass Systeme im

⁴siehe Abschnitt 4.4 für Details zur Analyse.

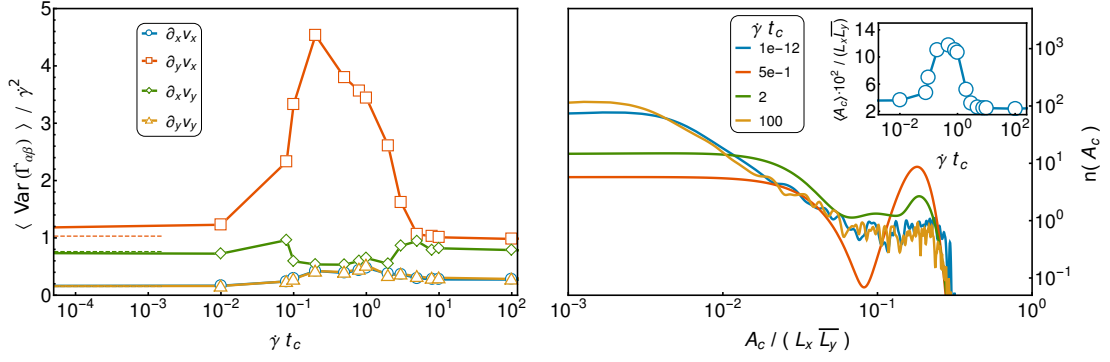


Abbildung 4.23.: Links: Varianz der lokalen Scherrate im stationären Zustand in Abhängigkeit von t_c ($N = 6000$). Die gestrichelten Linien entsprechen dabei dem Grenzfall $t_c \rightarrow 0$. Rechts: Anzahlverteilung zusammenhängender Flächen mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \text{Var}(\dot{\Gamma}_{yx})^{1/2}$. Der Inset zeigt das erste Moment der dargestellten Verteilungen in Abhängigkeit von $\dot{\gamma} t_c$.

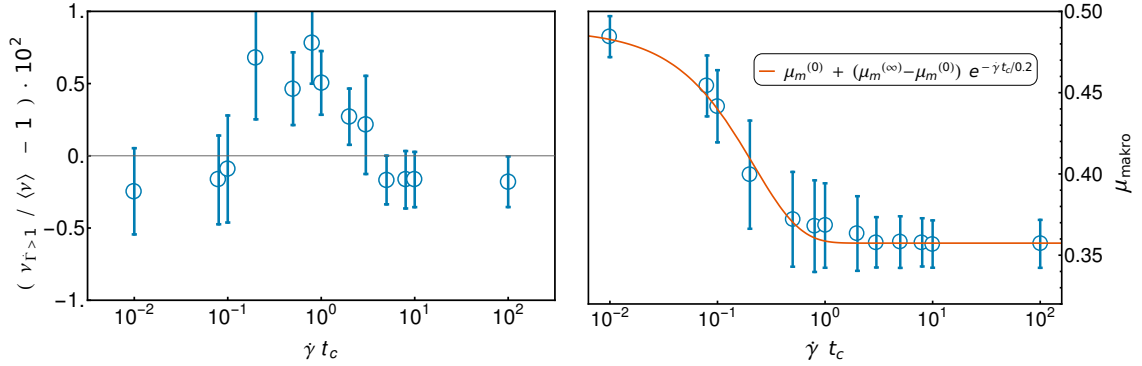


Abbildung 4.24.: Packungsdichte von Bereichen mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \dot{\gamma}$ im Verhältnis zur mittleren Packungsdichte (links) und makroskopischer Reibungskoeffizient (rechts) des stationären Zustand in Abhängigkeit von t_c für $N = 6000$. Die Fehlerbalken entsprechen der Standardabweichung.

Mittel unter Scherdeformation verdichten, zeigt die Analyse des Verhältnis der lokalen Packungsdichte in Bereichen mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \dot{\gamma}$ zur mittleren Dichte des Systems ein differenzierteres Bild (Abb. 4.24, links). Bereiche mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \dot{\gamma}$ besitzen sowohl im adhäsionsbestimmten als auch im zementierungsbestimmten Grenzfall eine kleinere Packungsdichte, d.h. zeigen Dilatanz. Die Antikorrelation zwischen Packungsdichte und lokaler Scherrate ist bekannt [164]. Exotisch ist hingegen der inverse Fall, also die Korrelation von Packungsdichte und lokaler Scherrate im Bereich $\dot{\gamma} t_c \approx 1$. Hier übersteigt die Packungsdichte in Bereichen mit $\dot{\Gamma}_{yx} > \dot{\gamma}$ die mittlere Packungsdichte. Ein bemerkenswertes Ergebnis, das jedoch den geringeren Adhäsionskräften durch kürze Kontaktzeiten geschuldet ist.

Die Abhängigkeit des mechanischen Verhaltens von t_c offenbart ein ähnliches Bild. Für alle $t_c > 10^{-2}/\dot{\gamma}$ entfestigt das System mit steigender Scherdeformation, d.h. μ_{makro} nimmt mit steigender Scherdeformation ab ohne ein Maximum zu durchlaufen (nicht abgebildet). Der makroskopische Reibungskoeffizient im stationären Zustand zeigt einen

stetigen Übergang zwischen den Grenzfällen des Reibungskoeffizienten kohäsiver und kohäsionsloser Haufwerke (Abb. 4.24, rechts) und kann mit der Funktion

$$\mu_{\text{makro}}(t_c) = \mu_{\text{makro}}^{(\infty)} + (\mu_{\text{makro}}^{(0)} - \mu_{\text{makro}}^{(\infty)}) e^{-t_c/t_c^*} \quad (4.37)$$

modelliert werden, welche durch das Zeitverfestigungsgesetz (Gl. (4.2)) inspiriert ist. Dabei beschreibt $\mu_{\text{makro}}^{(0)}$ den Reibungskoeffizient im Grenzfall $t_c \rightarrow 0$ und $\mu_{\text{makro}}^{(\infty)}$ den Reibungskoeffizienten kohäsionsloser Materie. Die durch Fit bestimmte ausgezeichnete Verbackungszeit in Gl. (4.37) beträgt $\dot{\gamma} t_c^* \approx 0.2$ und entspricht in etwa dem Maximum der Varianz von $\dot{\Gamma}_{yx}$. Dies widerspricht zunächst der Erwartung, dass der Übergang um $\dot{\gamma} t_c = 1$ zentriert ist, wenn die Verfestigungszeit der mittleren Kontaktzeit (näherungsweise $1/\dot{\gamma}$) entspricht. Dieser Zusammenhang gilt jedoch nicht für inhomogene Scherung, d.h. den Schlüssel zum Verständnis dieser ausgezeichneten Verbackungszeit liefert die Analyse von Scherlokalisierung im nächsten Abschnitt.

4.6.2. Scherlokalisierung in zeitverfestigender granularer Materie

Um die Frage zu beantworten warum die ausgezeichnete Verfestigungszeit t_c^* nicht $1/\dot{\gamma}$ entspricht, betrachten wir zunächst ein einfaches, eindimensionales Modell. Nehmen wir an, dass die Deformation auf einen Bereich der Breite w_{sb} beschränkt sei. Die Scherrate innerhalb dieses Bereiches sei konstant und außerhalb Null. Konform mit der Randbedingung Gl. (4.26) ist die Scherrate dann durch

$$\dot{\Gamma}_{yx}(y) = \dot{\gamma} \frac{L_y}{w_{\text{sb}}} \mathcal{H}\left(\frac{w_{\text{sb}}}{2} - |y - y_{\text{sb}}|\right) \quad (4.38)$$

gegeben, wobei y_{sb} die Scherbandposition beschreibt. Die mittlere Kontaktzeit im Scherband kann durch die inverse Scherrate, also $t_k \approx w_{\text{sb}}/(\dot{\gamma} L_y)$, abgeschätzt werden. Falls Konfigurationen bevorzugt werden, in denen der scheraktive Bereich um y_{sb} nicht verbacken ist, sollte die Kontaktzeit in diesem Bereich $t_k \leq t_c$ sein. Zur groben Abschätzung setzen wir

$$t_c = t_k = \frac{w_{\text{sb}}}{\dot{\gamma} L_y} \Leftrightarrow w_{\text{sb}} = \dot{\gamma} t_c L_y \quad , \quad (4.39)$$

d.h. es ergibt sich ein linearer Zusammenhang zwischen Scherbandbreite und Verfestigungszeit. Je schneller Kontakte verbacken, umso kleiner muss das Scherband sein, damit unverbackene Kontakte existieren. Es ist davon auszugehen, dass eine untere Schranke für w_{sb} existiert, da Scherbänder i.d.R. eine endliche Breite aufweisen [13, 14]. Diese untere Schranke definiert nach Gl. (4.39) ein t_c^* , ab welchem Scherlokalisierung bevorzugt wird. Schätzten wir die minimale Scherbandbreite mit $10\langle d \rangle$ ab [13], folgt für die hier betrachteten Systemgrößen $\dot{\gamma} t_c^* \approx 0.14$, was in etwa dem Übergang entspricht. Sicherlich sind Proportionalitätskonstanten in Gl. (4.39) zu beachten und eine minimale Breite zu bestimmen. Dennoch liefert dieses Modell die Idee für $\dot{\gamma} t_c^* \neq 1$. Darüber hinaus impliziert eine minimale Scherbandbreite einen scharfen Übergang zum homogenen Fließen bei kleinen t_c und Gl. (4.39) einen linearen Zusammenhang zwischen Scherbandbreite und Verfestigungszeit.

Diese qualitativen Aussagen zum Verhalten zeitverfestigender granularer Materie sollen durch eine genauere Analyse verfeinert werden. Dazu modellieren wir Momentaufnahmen des Scherratenprofils, trotz der Erkenntnis aus Abschnitt 4.3.1, durch eine charakteristische Funktion. Inspiriert durch die Scherbandmessungen fernab von Wänden von Fenistein et al. [14, 251] nutzen wir für alle t_c die Gauß-Funktion

$$\dot{\Gamma}(y) = \dot{\gamma} \frac{L_y}{\sqrt{2\pi} w_{sb} \operatorname{erf}\left(\frac{L_y}{2\sqrt{2} w_{sb}}\right)} e^{-\frac{1}{2} \frac{(y-y_{sb})^2}{w_{sb}^2}}. \quad (4.40)$$

Als Gütekriterium für die Qualität des Fits dient das Verhältnis aus der Summe der quadratischen Abweichungen von Messwerten und Theorie zur Varianz der lokalen Scherrate. Konventionell wird dieses Verhältnis von Eins abgezogen und als Bestimmtheitsmaß R^2 bezeichnet. Oft bei linearer Regression angewandt, gibt R^2 an, ob ein linearer Zusammenhang die Daten besser als eine Konstante beschreibt. Für schlechte Modelle ist die Summe der quadratischen Abweichungen zum theoretischen Wert nicht wesentlich kleiner als die Varianz aller Messwerte, was einem R^2 nahe Null entspricht. Gibt es keine Abweichung zwischen Theorie und Messwerten ist $R^2 = 1$. Die Verwendung des Bestimmtheitsmaßes bei nicht-linearer Regression ist etwas diffiziler. Es muss ein Schwellwert für R^2 definiert werden, ab welchem die Güte der theoretischen Beschreibung hinreichend ist. Eine optische Kontrolle unterschiedlichster Zeitpunkte zeigt, dass Fits mit $R^2 > 0.9$ den Verlauf der lokalen Scherrate hinreichend genau beschreiben (siehe Abb. 4.25(a) und 4.25(b)).

In den beiden Grenzfällen $t_c \rightarrow 0$ und $t_c \rightarrow \infty$ fluktuiert die lokale Scherrate stark und wird nur für wenige Momentaufnahmen gut durch Gl. (4.40) beschrieben. Gemessene Scherbandbreiten variieren zwischen wenigen Partikeldurchmessern und einem Vielfachen der Systembreite ($w_{sb} \rightarrow \infty$ entspricht einem linearem Profil). Im Gegensatz dazu ist das Scherratenprofil für $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ stark lokalisiert, d.h. gaußförmig mit einer konstanten Breite die mit der Verfestigungszeit wächst (Abb. 4.25(b)). Der Inset von Abb. 4.25(c) zeigt das Bestimmtheitsmaß in Abhängigkeit von t_c . Lediglich um $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ gilt im Mittel $R^2 > 0.9$. Im Gegensatz zur Scherbandbreite ist die Position des Scherbands y_{sb} zeitlich nicht näherungsweise konstant (Abb. 4.25(d)). Rotationsereignisse verändern die Scherbandposition sprunghaft. Darüber hinaus gibt es auch eine langsame Bewegung von y_{sb} . Die mittlere quadratische Verschiebung offenbart subdiffusives Verhalten ($\propto (\Delta t)^{1/3}$, nicht abgebildet), wobei das Beobachtungsintervall $\dot{\gamma} \Delta t \leq 10$ nur eine unzureichende Basis für eine genaue Bestimmung liefert. Möglich wäre, dass die Bewegung des Scherbands durch Gradienten der lokalen Packungsdichte getrieben wird und somit präparationsabhängig ist.

Im Rahmen einer lokalen Rheologie kann das Auftreten von stationären Scherbändern im eigentlich homogenen Fluss zeitverfestigender Schüttgüter qualitativ verstanden werden. Grundlage bildet das Prinzip minimaler Energiedissipation [252, 253], welches im Kontext granularer Materie bereits zur Vorhersage der Scherbandposition beim stationären Fluss mit definierten Randbedingungen benutzt wurde [254, 205, 255]. Unter der Annahme, dass die zur Scherung geleistete Arbeit vollständig dissipiert, ist die Dissipationsrate proportional zum Produkt aus Schubspannung τ und Scherrate $\dot{\gamma}$ [62]. Für

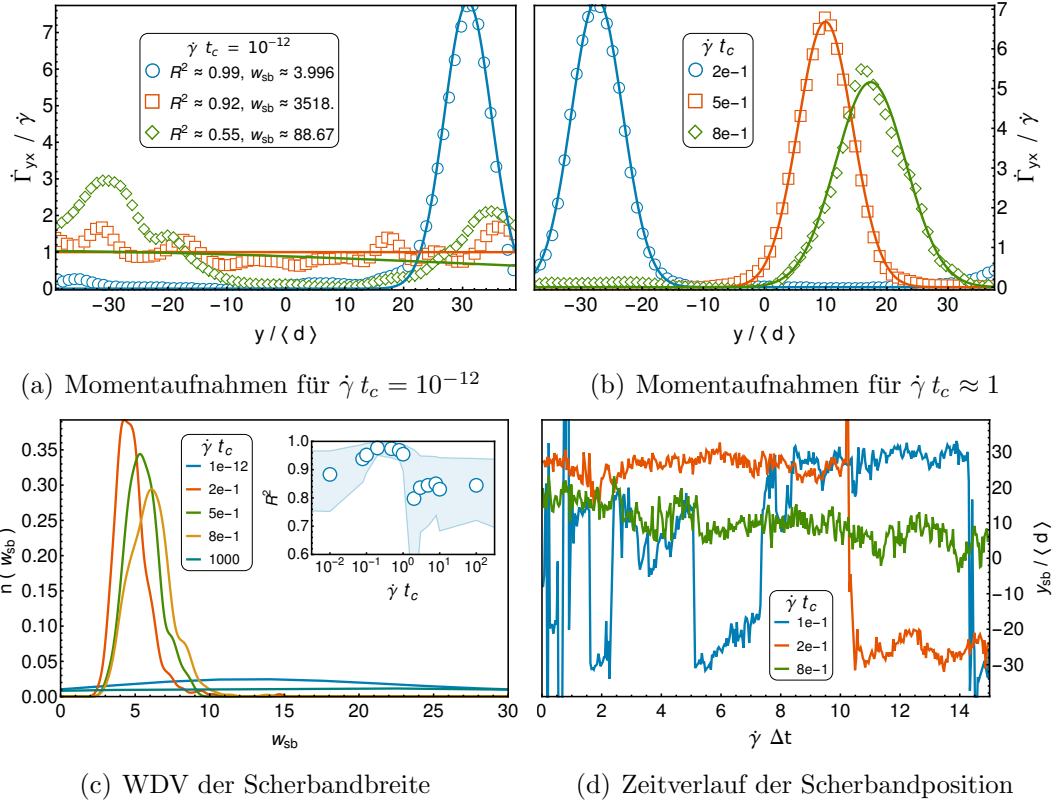


Abbildung 4.25.: Anpassung eines gaußschen Scherratenprofils an Momentaufnahmen des Scherratenfelds: Beispielbilder der lokalen Scherrate $\dot{\gamma}_{yx}$ inkl. Fit (oben). WDV der Scherbandbreite und Zeitverlauf der Scherbandposition (unten). Der Inset von (c) zeigt die mittlere Gütezahl des Fit, der schattierte Bereich das Intervall zwischen 0.1-Quantil und 0.9-Quantil.

das betrachtete System ist die Schubspannung i.A. auch eine Funktion der Scherrate. Aus Gleichung (2.7) folgt

$$\tau(\dot{\gamma}) = \tau_{\min}(\eta) + b(\eta) \sqrt{m P} \dot{\gamma} \quad , \quad (4.41)$$

wobei sowohl die kritische Schubspannung τ_{\min} (vgl. Abschnitt 4.5), als auch der Koeffizient b näherungsweise linear mit der Kohäsionszahl η steigen [64]. Aus dem mikroskopischen Kontaktgesetz (4.2) folgt eine i.A. inhomogene Kohäsionszahl

$$\eta = \eta^{(\max)} \left(1 - e^{-\frac{t_k(\dot{\gamma})}{t_c}} \right) \quad , \quad (4.42)$$

mit einer noch zu bestimmenden Kontaktzeit t_k , die von der Scherrate abhängt. Diese Funktion kann jedoch nicht ohne weitere Annahmen spezifiziert werden. Die Kombination aus Gleichungen (4.41) und (4.42) liefert

$$\tau(\dot{\gamma}, t_c) = \tau(0) + \tilde{\alpha} \left(1 - e^{-\frac{t_k(\dot{\gamma})}{t_c}} \right) + \left(\tilde{b}_0 + \tilde{b}_1 \left(1 - e^{-\frac{t_k(\dot{\gamma})}{t_c}} \right) \right) \dot{\gamma} \quad , \quad (4.43)$$

wobei sowohl die Schubspannung $\tau(0)$, als auch $\tilde{\alpha} = \alpha \cdot \eta^{(\max)}$ in Abschnitt 4.5 gemessen worden sind. Die Koeffizienten der Scherrate in Gleichung (4.43) (\tilde{b}_0, \tilde{b}_1) sind für

das hier verwendete Kontaktmodell unbestimmt, jedoch bietet die Literatur $\tilde{b}_0 \approx \sqrt{\pi/4}$ und $\tilde{b}_1 \approx 25/80 \sqrt{\pi/4}$ an [64]. Zur weiteren Auswertung vollziehen wir den Übergang zu einer lokalen Rheologie, d.h. betrachten die lokale Scherrate $\dot{\Gamma}(y) \equiv \dot{\Gamma}_{yx}(y)$ als Funktion der Höhe. Die Zeitabhängigkeit der lokalen Scherrate soll für diese Betrachtung zunächst vernachlässigt werden. Die Kontaktzeit in einer Schicht der Höhe y wird durch die inverse Scherrate bestimmt. Hier setzen wir

$$t_k(y) = \frac{1}{\dot{\Gamma}(y)} \quad , \quad (4.44)$$

Die Kombination aus Gl. (4.43) und (4.44) liefert die Dissipationsrate

$$\mathcal{W}_{\text{dis}}(t_c) [\dot{\Gamma}] = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \tau \left(\dot{\Gamma}(y), \eta \left(\dot{\Gamma}(y), t_c \right) \right) \dot{\Gamma}(y) dy \quad (4.45)$$

als Funktional der lokalen Scherrate $\dot{\Gamma}$, die aufgrund der vernachlässigten Zeitabhängigkeit bis auf einen Faktor der dissipierten Energie entspricht. Aufgrund des gaußförmigen Scherratenprofils für Verfestigungszeiten $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ nutzten wir im Folgenden Gl. (4.40) zur Auswertung der Dissipationsrate. Damit reduziert sich $\mathcal{W}_{\text{dis}}(t_c) [\dot{\Gamma}]$ auf eine Funktion der Verfestigungszeit t_c und Scherbandbreite w_{sb} , deren Minimum zu bestimmen ist. In den beiden Grenzfällen ($t_c \rightarrow 0$ und $t_c \rightarrow \infty$) lässt sich das Integral aus Gleichung (4.45) analytisch lösen. Für endliches t_c wurde eine numerische Integration mit Hilfe des Computer Algebra System Mathematica durchgeführt.

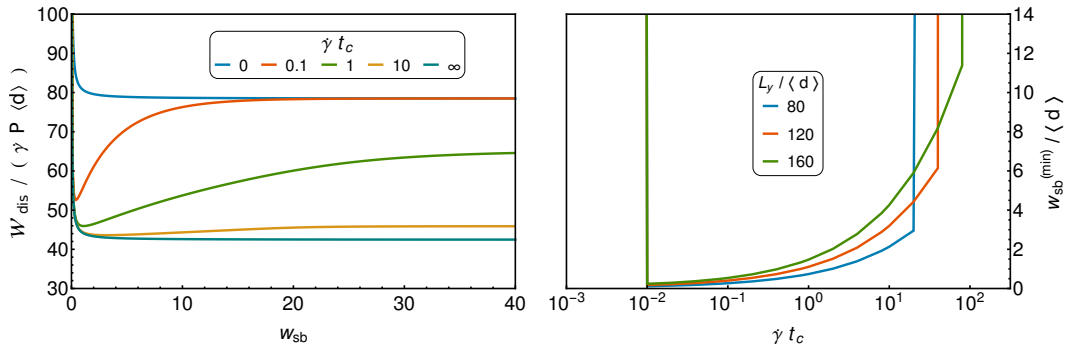


Abbildung 4.26.: Dissipationsrate in Abhängigkeit der Scherbandbreite für verschiedene Verfestigungszeiten bei $L_y = 120$ (links) und minimale Scherbandbreite für verschiedene L_y (rechts).

Sowohl für den zementierungs- als auch den adhäsionsbestimmten Grenzfall fällt die geleistete Arbeit monoton mit zunehmender Scherbandbreite, d.h. homogener Fluss wird vorhersagt ($w_{\text{sb}}^{(\text{min})} \rightarrow \infty$). In einem kleinen Bereich um $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ zeigt die Dissipationsrate ein Minimum bei endlichem w_{sb} (Abb. 4.26, links). Der rechte Graph in Abb. 4.26 zeigt das Minimum der Dissipationsrate als Funktion der Verfestigungszeit für verschiedene Systemhöhen. In einem Bereich endlicher Breite um $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ liegt das Minimum der Dissipationsrate bei endlichen Scherbandbreiten. Die Scherbandbreite steigt dabei sublinear mit t_c , anders als im Modell mit stufenförmigem Scherratenprofil

(Gl. (4.38)) prognostiziert. Der Koeffizient wächst linear mit der Systemgröße. Sowohl die Breite des Bereiches der Scherlokalisierung, als auch $w_{\text{sb}}^{(\text{min})}$ werden durch die Koeffizienten der Scherrate in Gl. (4.43) beeinträchtigt. Der Übergang zum homogenen Fluss in Abhängigkeit von t_c ist unstetig.

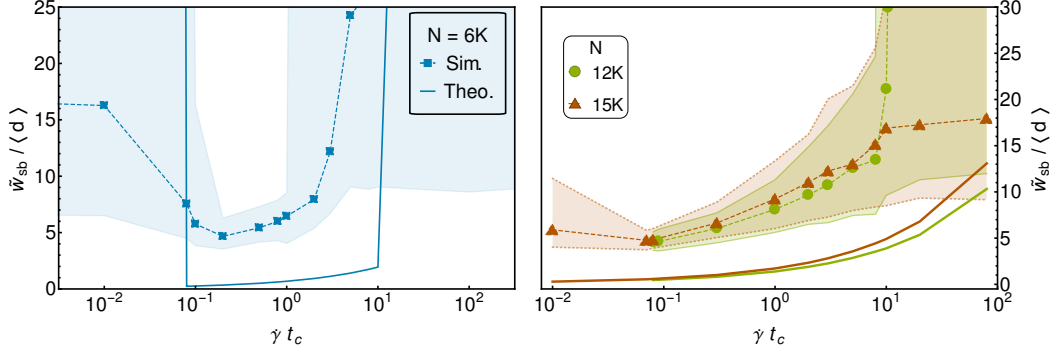


Abbildung 4.27.: Scherbandbreite in Abhängigkeit der Verfestigungszeit für verschiedene Systemhöhen. Das Intervall zwischen 0.1-Quantil und 0.9-Quantil ist schattiert. Die durchgezogene Linie verbindet die durch das Prinzip minimaler Energiedissipation vorhergesagten Scherbandbreiten.

Abb. 4.27 zeigt einen Vergleich zwischen den gemessenen Scherbandbreiten durch Anpassung eines gaußförmigen Scherratenprofils und der theoretischen Scherbandbreite nach dem Prinzip minimaler Energiedissipation unter Annahme einer gaußförmigen Scherrate. Aufgrund der „Ausreißer“ von w_{sb} bei nahezu homogener Scherung wurde der Median benutzt und die Verteilung der gemessenen Werte wie folgt angedeutet: Die schattierte Zone entspricht dem Bereich zwischen 0.1-Quantil und 0.9-Quantil der Verteilung. Es zeigt sich eine qualitativ korrekte Abschätzung der Funktion $w_{\text{sb}}^{(\text{min})}(t_c)$ um $\dot{\gamma} t_c \approx 1$. Die gemessene Scherbandbreite nimmt sublinear mit t_c zu und steigt mit der Systemgröße, wird allerdings von der Theorie systematisch um einen Faktor ≈ 5 unterschätzt. Es existiert ein minimales $w_{\text{sb}} \approx 4$, welches mit typischen Scherbandbreiten in kohäsionsloser granulare Materie übereinstimmt [13]. Während die Theorie einen scharfen Übergang zwischen lokalisierter Scherung und homogenen Fluss vorher-sagt, sind die Grenzbereiche in Abhängigkeit von t_c in den Simulationen schwer zu erfassen. Hier versagt vor allem die Annahme einer gaußförmigen Scherlokalisierung, wie die schattierten Bereiche zeigen. Dennoch liefert das Modell erstaunlich gute Resultate in Anbetracht der vereinfachenden Annahmen, die im Folgenden zusammen mit möglichen Erweiterungen diskutiert werden sollen.

Eine eklatante Differenz zwischen Simulationsergebnissen und Theorie liegt in der minimalen Scherbandbreite. Dabei sei angemerkt, dass der Einfluss der coarse-graining-Länge $\ell = \langle d \rangle$ vernachlässigt werden kann. Weder Verdoppelung noch Halbierung von ℓ führen zu einer signifikanten Änderung. Da allein der Partikeldurchmesser eine charakteristische Länge der lokalen Rheologie darstellt, ist es überraschend, dass eine andere, endliche charakteristische Längenskala vorhergesagt werden kann. Unklar ist, ob die Unterschätzung von w_{sb} auf den Mangel einer anderen intrinsischen Längenskala zurückzuführen ist. Das Prinzip minimaler Energiedissipation ist nicht

infrage zu stellen, sondern die formulierte Dissipationsrate. Muss der Theorie ein weiterer Längenparameter hinzugefügt werden? In der vorgestellten Theorie verhindert die lineare Zunahme der Schubspannung mit $\dot{\Gamma}$ (konstitutives Gesetz Gl. (2.7)) den Fall $w_{sb} \rightarrow 0$. Größere Scherbandbreiten können demnach erwirkt werden, wenn der Koeffizient der Scherrate $\tilde{b}(\eta)$ als Fitparameter genutzt, oder eine minimale Scherbandbreite in Gl. (4.40) berücksichtigt wird. Um $w_{sb} \approx 4$ zu reproduzieren, müsste der Koeffizient der Scherrate jedoch um einen Faktor 10 – 20 erhöht werden. Auch wenn es sich um einen Materialparameter handelt, ist ein solcher Faktor unrealistisch groß. Darüber hinaus würde der Einfluss der Systemhöhe bei Verwendung dieses Fitparameters überschätzt. Eine minimale Scherbandbreite würde hingegen den funktionalen Zusammenhang $w_{sb}(t_c)$ nicht korrekt reproduzieren.

Anstatt in der Theorie Fitparameter einzuführen wäre eine Revision der verwendeten Näherungen ratsam. Dies betrifft primär den Zusammenhang zwischen Kontaktzeit und Scherrate und damit die Voraussetzung zur Verwendung eines eindimensionalen Modells: Translationsinvarianz in Scherrichtung (x). Die Kontaktzeit wird nicht allein von $\dot{\Gamma}_{yx}$, sondern auch von $\dot{\Gamma}_{xy}$ bestimmt. Rotation von Clustern jedweder Größe führen zu einem Aufbrechen der Kontakte zwischen den rotierenden Clustern. Abhängig von den Adhäsionskräften brechen die Kontakte innerhalb des Clusters hingegen fast nicht. Dies führt zu einer inhomogenen Kontaktzeitverteilung $t_k(x, y)$, die nicht allein auf die Scherrate $\dot{\Gamma}_{yx}$ zurückzuführen ist. Da es sich um keine stationären Wirbel handelt, ist die Berücksichtigung dieses Effekt in der Theorie schwierig.

Darüber hinaus ist auch die Vernachlässigung der Zeitabhängigkeit von $\dot{\Gamma}(y)$ problematisch. Zwar prophezeit die Theorie ein lineares Scherprofil ($w_{sb} \gg L_y$) im adhäsions- und zementierungsbestimmen Grenzfall, dies ist jedoch nur im zeitlichen Mittel korrekt. Denkbar wäre deshalb eine Gauß-Funktion als Ansatz für das zeitlich gemittelte Scherratenfeld. Um weiterhin das Prinzip minimaler Energiedissipation anwenden zu können, bedingt ein solcher Ansatz die Modellierung von Fluktuationen, zumindest näherungsweise. Kurze Korrelationszeiten (vgl. Abb. 4.18) legen eine statistische Modellierung nahe. Vorstellbar wäre die Idee von der Forschergruppe Groupement De Recherche Milieux Divisés aufzugreifen und auf Basis der Prandtlschen Mischlänge eine nicht-lokale Rheologie zu berücksichtigen [15]. Prandtl verknüpfte Fluktuationen v' im Strömungsfeld einer Flüssigkeit in einem Rohr mit dem zeitlich gemittelten Strömungsfeld \bar{v} durch $v' \propto \ell_w \partial_y \bar{v}$ [200]. Die dabei verwendete Länge ℓ_w entspricht einem Wirbeldurchmesser und könnte angewandt auf das oben geschilderte Problem zeitlich fluktuieren. Die Korrelationslänge der Fluktuationen (vgl. Abb. 4.5) könnte auch als Motivation dienen die Fluktuationen am Ort y proportional zur Krümmung des zeitlich gemittelten Feldes zu setzen. Auch hier wäre eine zeitabhängige Proportionalitätskonstante vorstellbar. Solche Modifikationen würden Fluktuationen natürlich eher qualitativ behandeln, stellen aber im Gegensatz zu Fitparametern jedoch sinnvolle Erweiterungen dar.

Zusammenfassung und Ausblick: Untersucht wurde das Aufbrechen und der stationäre Fließzustand lockerer, verbackener Proben (kritischer Zustand für $\eta = 10$) unter Variation der Verfestigungszeit t_c . Für alle Verfestigungszeiten $t_c > 10^{-2}/\dot{\gamma}$ verhält sich das System mechanisch entfestigend, d.h. Probevolumen und Schubspannung sinken mit steigender Scherdeformation. Das Bruchverhalten ist systemgrößenabhängig. Im zementierungsbestimmten Grenzfall großer Systeme wächst der initiale Riss mit steigender Scherdeformation und führt zu einer stückweise exponentiellen Abnahme des Anteils verbackener Kontakte mit Bruchzeiten der Größenordnung $100/\dot{\gamma}$. Kleinere Systeme brechen homogen auf einer Zeitskala $\approx 1/\dot{\gamma}$. Der stationäre Zustand des adhäsions- und zementierungsbestimmten Grenzfalls entspricht einem homogenen Deformationsfeld ohne Restverbackung. Im Bereich $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ lokalisiert die Deformation, d.h. für Verfestigungszeiten $\approx 1/\dot{\gamma}$ gibt es keinen homogenen Fluss. Das Scherratenprofil in diesem Bereich lässt sich durch eine Gauß-Funktion approximieren. Die Scherbandbreite wächst mit der Verfestigungszeit t_c . Aufgrund geringerer Adhäsionskräfte durch kürzere Kontaktzeiten ist die Packungsdichte innerhalb der Scherzone größer als die mittlere Packungsdichte, d.h. es tritt Kompaktanz statt Dilatanz auf. Im Rahmen einer lokalen Rheologie kann diese Scherlokalisierung mit dem Prinzip minimaler Dissipation qualitativ vorhergesagt und verstanden werden. Dabei werden die in der Simulation beobachteten Scherbandbreiten unterschätzt.

Neben der Anwendung des Zeitverfestigungsmodells in 3D Simulationen wäre ein direkter Vergleich zu wandgetriebenen Simulationen interessant. Unklar ist, ob auch mit Wand die Scherbandbreite von $\dot{\gamma} t_c$ abhängt, oder stets einer minimalen Breite entspricht. Dies könnte auch experimentell überprüft werden, wobei statt t_c wahrscheinlich $\dot{\gamma}$ zu variieren ist (siehe auch nächstes Kapitel). Da in wandgetriebenen Simulationen die Rotation des gesamten Systems unterdrückt wird, kann die Dynamik der Scherbandbewegung einfacher überprüft und quantifiziert werden. Hier ist auch der Einfluss der Anfangskonfiguration und eine mögliche Kausalität zur Bewegung der Scherbandmittelpunkte zu prüfen. Darüber hinaus kann die Theorie zur Scherlokalisierung unter Berücksichtigung von Fluktuationen und einer nicht-lokalen Rheologie erweitert werden.

KAPITEL 5

Modellierung des Fließverhaltens von Kaliumchlorid

In diesem Kapitel wird Kaliumchlorid als Beispielmateriale für Schüttgüter mit Zeitverfestigung betrachtet. Es handelt sich um einen bei Raumtemperatur kristallinen Feststoff mit kubischer Gitterstruktur der industriell vielseitig eingesetzt wird. Einsatzgebiete sind in der Lebensmittelindustrie als Festigungsmittel und Geschmacksverstärker (E 508), oder zur Fertigung von Kalidünger. Als hochdosierte Injektion führt Kaliumchlorid zum Herzstillstand und wird deshalb auch für Hinrichtungen mit Giftspritze verwendet [256].

Wir betrachten ein Schüttgut aus μm großen Kaliumchloridpartikeln und stellen auf Grundlage mikroskopischer sowie makroskopischer Experimente ein Kontaktmodell vor, welches das Fließverhalten abbildet. Offene Parameter des Kontaktmodells werden mit Hilfe der Partikelform bestimmt und zur Kalibrierung genutzt. Anschließend wird eine Validierung durchgeführt. Analysen der Struktur sowie der Einfluss der Modellierung von Adhäsionskräften auf das makroskopische Verhalten liefern dabei wichtige Erkenntnisse zum Verständnis der Rheologie kohäsiver und zeitverfestigender Medien. Die Ergebnisse dieses Abschnitts wurden in Kooperation mit S. Strege, H. Zetzener und A. Kwade vom Institut für Partikeltechnik der TU Braunschweig erarbeitet und in [215] veröffentlicht. Alle experimentelle Ergebnisse stammen von S. Strege und sollen zum Verständnis dieses Kapitels auszugsweise wiedergegeben werden. Weitere Details zu Experimenten sind der Veröffentlichung zu entnehmen.

Zur Modellfindung sind sowohl das mechanische Verhalten des verfestigten Schüttguts als auch die Kontaktmechanik der Partikel und deren Auswirkung auf das Partikelensemble relevant. Die experimentelle Untersuchung der Kontaktmechanik μm großer Partikel ist sehr anspruchsvoll [106]. So erfordert z.B. die Bestimmung der Bruchfestigkeit von Feststoffbrücken zwischen einzelnen Partikeln eine extreme Expertise. Dies wurde von Bröckel et. al [257, 258] für mm große Harnstoffpartikel durchgeführt. Der Durchmesser der Feststoffbrücke und damit die Stabilität der Verbindungen zwischen

diesen Harnstoffpartikeln wird maßgeblich durch Temperatur und Luftfeuchtigkeit beeinflusst. Auch wurde ein Regime hoher Temperaturen und Feuchtigkeit identifiziert, in dem sich die Partikel vollständig auflösen. Frühere Arbeiten zu diesem Thema fokussierten lediglich die mechanischen Eigenschaften einzelner Feststoffbrücken [259]. Aufgrund der Relevanz für die Industrie sind „makroskopische“ Experimente, d.h. ist die Bestimmung der Festigkeit verbackener Schüttgüter, häufiger durchgeführte Analysen [260–262]. Für nichtkohäsive, zeitverfestigende Pulver wurde eine Kombination aus mikro- und makroskopischen Experimenten sowie Simulationen von Wahl et al. [263] durchgeführt.

Theoretische Arbeiten zur Zeitverfestigung von Schüttgütern sind (abhängig von dem zu Grunde liegenden Mechanismus) rar [264, 33, 35]. Für den hier betrachteten Feststoff Kaliumchlorid wurde die uniaxiale Druckfestigkeit in Abhängigkeit der Lagerungszeit von Tomas und Schubert [33] berechnet. Dabei wurde angenommen, dass eine Entfeuchtung des Schüttguts dazu führt, dass das in Feuchtigkeitsbrücken gelöste Material an den Kontakten ausfällt. Das verwendete kinematische Modell führte zu der gleichen Zeitabhängigkeit, wie sie im 2D-Modell dieser Arbeit verwendet wurde (siehe Kap. 4.1.1), zeigte jedoch nur partielle Übereinstimmung mit dem Fließverhalten von Kaliumchlorid (Partikelgröße 40 – 500 μm).

Neben experimentellen und theoretischen Arbeiten liefern auch numerische Berechnungen wichtige Erkenntnisse zum Fließverhalten verbackener Pulver. Wie bereits in Kap. 4.6 erwähnt, wird meist der irreversible Bruch zementierter Materie untersucht. Die verschiedenen Modellierungsansätze basieren zwar teilweise auf experimentellen Befunden [241], beschränken sich jedoch meist auf 2D Systeme [207, 243, 43, 128]. Nur wenige Arbeiten modellieren das Bruchverhalten in 3D [244, 265].

5.1. Experimentelle Produktcharakterisierung

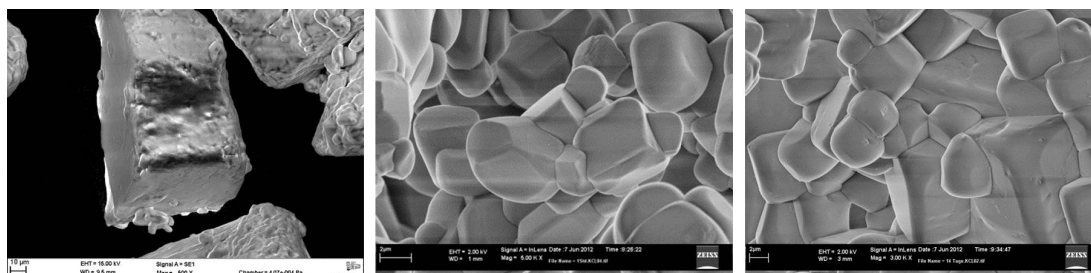


Abbildung 5.1.: SEM Bild der KCl Partikel: Ausgangsprodukt (links), frisch gemahlenes Produkt (mitte) und gemahlenes Produkt nach 14 Tagen Lagerung (rechts). Bild aus [215] entnommen.

Der hier betrachtete Modellstoff wurde durch ein spezielles Mahlverfahren [266] auf eine mittlere Partikelgröße von $x_{50,3} = 20 \mu\text{m}$ gemahlen¹. SEM-Aufnahmen einzelner

¹ $x_{50,3}$ ist der Partikeldurchmesser, welcher dem Median der Partikelgrößenverteilung Q_3 , also der Massenverteilung entspricht.

Partikel zeigen, dass die Partikelform nicht kugelförmig, sondern näherungsweise kubisch ist (Abb. 5.1). Des Weiteren wurde die Kontaktmechanik einzelner Partikel durch Nanoindentationsversuche² untersucht. Diese offenbaren fast ausschließlich plastisches Kontaktverhalten. Weitere Details zur Charakterisierung des Modellstoffes sind in [215] dargestellt.

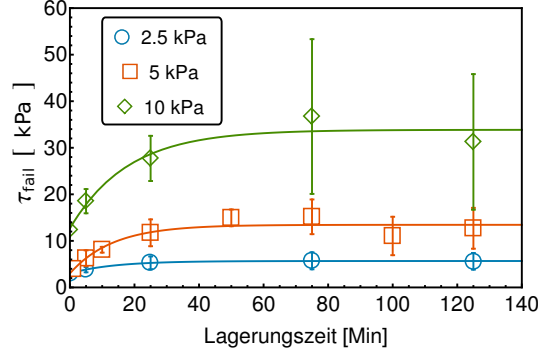


Abbildung 5.2.: Abscherschubspannung als Funktion der Lagerungszeit für verschiedene Anschernormalspannungen $\sigma_{\text{pre}} \in \{2.5, 5, 10\}$ kPa. Die Abscherschubspannung beträgt $0.6 \sigma_{\text{pre}}$. Experimente durchgeführt von S.Strege [215].

Das Fließverhalten des so hergestellten KCl Pulvers wurde mit einem Ringschertester untersucht. Wie in Kap. 2.1.2 erklärt, wird die Probe zur Präparation in den kritischen Zustand gebracht („Anscheren“) und anschließend der Fließort durch Scheren unter verringerter Normalspannung („Abscheren“) abgetastet [75]. Um Zeitverfestigung zu quantifizieren, wird das Schüttgut zwischen An- und Abscheren eine bestimmte Zeit unter konstanter Last und konstanten klimatischen Bedingungen (relative Luftfeuchtigkeit $\approx 55\%$) gelagert. Makroskopisch zeigt sich, dass Kaliumchlorid auf einer charakteristischen Zeitskala $t_c \approx 15$ min verbackt (siehe Abb. 5.2). Die Abscherschubspannung nach Lagerungszeit t kann durch

$$\tau_{\text{fail}}(t) = \tau_{\text{fail},0} + (\tau_{\text{fail},\text{max}} - \tau_{\text{fail},0}) (1 - e^{-t/t_c}) \quad (5.1)$$

approximiert werden, wobei $\tau_{\text{fail},0}$ das frisch gemahlene und $\tau_{\text{fail},\text{max}}$ das zementierte Produkt beschreibt. Die Fließortmessung offenbart schon im frisch gemahlene Zustand ein sehr kohäsives Schüttgut. Auch ohne Zeitverfestigung wirken Adhäsionskräfte zwischen den Partikeln, sodass Kaliumchlorid sowohl den adhäsions- als auch den zementierungsbestimmten Grenzfall beinhaltet. Durch Lagerung wird die Adhäsionskraft frisch gemahlener Partikel durch eine Zementierung ersetzt. Sowohl $\tau_{\text{fail},0}$ als auch $\tau_{\text{fail},\text{max}}$ hängen von der Anschernormalspannung σ_{pre} ab. Im Rahmen der Messgenauigkeit ist t_c hingegen lastunabhängig. Während die Zeitabhängigkeit von Gl. (5.1) bisherige Ergebnisse der Literatur bestätigt, ist der Betrag des gemessenen t_c 's kleiner als die Resultate in [33] (Größenordnung Tage). Dies wird hauptsächlich der Aktivierung der Oberflächen durch den Mahlvorgang sowie der Partikelgröße und Partikelgrößenverteilung zugeschrieben. Mit abnehmender Partikelgröße (und zunehmender Polydispersität) nimmt die durchschnittliche Kontaktfläche zwischen Partikeln ab und ermöglicht ein schnelleres Verbacken. Da im Experiment kein lastabhängiges t_c gemessen wurde, wird dies

²Zur Methodik siehe [267]

bei der Modellierung nicht berücksichtigt. Darüber hinaus wurde keine signifikante Veränderung der Partikelmorphologie festgestellt (auch nach Wochen der Lagerung, siehe Abb. 5.1). In Kombination mit Gl. (5.1) gehen wir deshalb davon aus, dass die Zeitverfestigung durch Auskristallisieren der Kontaktfläche bewirkt wird und nicht durch Sinterprozesse wie in [34]. Auch eine Entfeuchtung des Schüttguts [33] ist aufgrund der konstant gehaltenen Luftfeuchtigkeit nicht wahrscheinlich.

5.2. Kontaktmodell

Die Literatur offeriert ein breites Spektrum an Kontaktmodellen für vielfältige Materialklassen: rein elastisch [268, 97], viskoelastisch [93, 94] und elastoplastisch [95, 96, 100, 99, 269], (mit und ohne Berücksichtigung von Adhäsionskräften). Dennoch ist die Kontaktmechanik μm großer Partikel ein nicht abgeschlossenes Forschungsfeld. Erst kürzlich ist ein neues elastoplastisches Kontaktmodell mit Adhäsionskräften gemäß der JKR-Theorie [139] vorgeschlagen worden [270, 101]. Die hier betrachteten KCl Partikel offenbaren eine sehr komplexe Kontaktmechanik, die von keinem Kontaktmodell der Literatur beschrieben wird. Der Modellstoff soll im Folgenden durch ein Ensemble an Kugel mit einer idealisierter Partikelgrößenverteilung dargestellt werden. Die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Partikeln muss dabei plastisches Deformationsverhalten aufweisen, aufgrund der Partikelgröße auch ohne Verfestigung eine attraktive Wechselwirkung beinhalten und im Falle langer Kontaktzeiten die Verbackung berücksichtigen. Zusätzlich sollte die Partikelform in irgendeiner Form in die Modellierung einfließen.

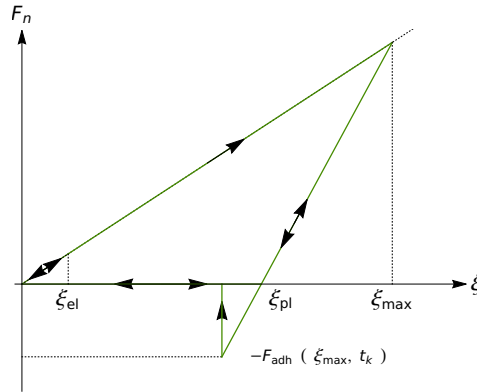


Abbildung 5.3.: *Plastisches Kontaktmodell für Kaliumchlorid. Normalkraft in Abhängigkeit vom Überlapp ξ .*

Betrachten wir die Normalkraft in Abhängigkeit des Überlapps $\xi = 1/2 (d_i + d_j) - |\underline{r}_{ij}|$, dargestellt in Abb. 5.3. Den repulsiven Anteil der Normalkraft ($F_n > 0$) bilden zwei Geraden die durch Materialeigenschaften (Elastizitätsmodul und Fließgrenze σ_{pl}), den durch externe Kraft (F_{ext}) erzwungenen maximalen Überlapp ξ_{max} sowie die Kontaktgeometrie bestimmt werden. Die experimentelle Charakterisierung der Kontaktmechanik durch Nanoindentationsversuche offenbarte, dass die initiale Belastung der Partikel

primär durch plastische Deformation bestimmt wird. Die Näherung rein plastischer Deformation [269] ist somit auch hier gerechtfertigt und die Kontaktkraft gegeben durch das Produkt aus plastischer Fließgrenze und Kontaktfläche. Es zeigt sich, dass die Kontaktfläche linear von ξ abhängt, dementsprechend gilt

$$F_{\text{pl}}(\xi) = \sigma_{\text{pl}} L_{\text{pl}} \xi \quad , \quad (5.2)$$

mit der charakteristischen Länge L_{pl} , die durch die Kontaktgeometrie bestimmt wird. Da die Steigung der Geraden experimentell gemessen wurde, können wir die Kontaktfläche zwischen Kugeln benutzen und o.B.d.A. $L_{\text{pl}} = \pi r_{\text{eff}}$ setzen, wobei $1/r_{\text{eff}} = 2/d_i + 2/d_j$ der Kontaktkrümmung entspricht.

Für $F_{\text{ext}} = F_{\text{pl}}(\xi_{\text{max}})$ ist der maximale Überlapp erreicht. Ein rein plastisches Material würde bei Entlastung $0 < F_{\text{ext}} \leq F_{\text{pl}}(\xi_{\text{max}})$ die externe Kraft bei festem Überlapp $\xi = \xi_{\text{max}}$ ausgleichen. Solche Zwangsbedingungen sind in DEM Simulationen mit weichen Partikeln nicht üblich und erinnern eher an die Kontaktdynamik-Methode. Darüber hinaus gibt es eine, wenn auch kleine, überlagerte elastische Deformation, welche die Entladung des Kontaktes bestimmt. Um diesen elastischen Entlastungszeit zu modellieren, betrachten wir eine homogene Spannungsverteilung σ auf der abgeplatteten Kontaktfläche mit der charakteristischen Länge L_{el} . Für rein elastische Deformation steigt die Spannung proportional zur Verzerrung ε mit einer elastischen Konstante σ_{el} , d.h. es gilt $\sigma = \sigma_{\text{el}} \varepsilon$. Schätzt man die Eindringtiefe der Verzerrung mit L_{el} ab [137] und betrachtet die Verzerrung $\varepsilon = \delta\xi/L_{\text{el}} = (\xi - \xi_{\text{pl}})/L_{\text{el}}$, so ergibt sich im Sinne von Walton und Braun [95] für das Kontaktmodell der lineare Entlastungszeit

$$F_{\text{el}}(\xi) = \sigma L_{\text{el}}^2 = \sigma_{\text{el}} L_{\text{el}} (\xi - \xi_{\text{pl}}) \quad , \quad (5.3)$$

bei welchem die verbleibende plastische Deformation des Kontaktes aufgrund der Randbedingung $F_{\text{el}}(\xi_{\text{max}}) = F_{\text{pl}}(\xi_{\text{max}})$ durch $\xi_{\text{pl}} = (1 - \sigma_{\text{pl}} L_{\text{pl}}/(\sigma_{\text{el}} L_{\text{el}}))\xi_{\text{max}}$ gegeben ist. Die Steigung der Geraden ist somit durch die elastische Konstante des Materials und die charakteristische Länge L_{el} der Kontaktfläche bestimmt. Letztere hängt i.A. von der plastischen Deformation ab, so gilt z.B. für Kugeln $\pi\sqrt{r_{\text{eff}}\xi_{\text{pl}}}$. Auch Ludings Kontaktmodell [100] beinhaltet eine steigende Kontaktsteifigkeit mit zunehmender Deformation. Alternativ zu diesem linearen Entlastungszeit schlägt Thornton [99] für Kugeln vor, dass lediglich die Krümmung der Kontaktfläche durch das plastische Fließen beeinflusst wird und somit ein Hertz'scher Entlastungszeit $\propto (\xi - \xi_{\text{pl}})^{3/2}$ mit größerer Krümmung berücksichtigt werden muss. Nanoindentationsversuche von Kaliumchloridpartikeln zeigen eine extrem große Steigung des elastischen Zweiges im Vergleich zum plastischen Beladungszeit. Die Bestimmung des genauen Verlaufs des Entlastungszeit ist nicht möglich und Gl. (5.3) eine durchaus legitime Näherung. Motiviert durch die Kontaktmechanik von Kugeln und den experimentellen Befund nähern wir hier ξ_{pl} durch ξ_{max} an und setzen

$$L_{\text{el}} = \pi\sqrt{r_{\text{eff}}\xi_{\text{max}}} \quad . \quad (5.4)$$

Die Einführung eines elastischen Entlastungszeit geht einher mit der Berücksichtigung rein elastischer Deformation für $\xi < \xi_{\text{el}} = (\sigma_{\text{pl}}/\sigma_{\text{el}})^2 r_{\text{eff}}$. Dabei wird die Grenze

des elastischen Bereiches ξ_{el} durch den Punkt $\sigma_{\text{el}}L_{\text{el}} = \sigma_{\text{pl}}L_{\text{pl}}$ bestimmt. Im elastoplastischen Kontaktmodell von J. Tomas wird dieser elastische Bereich bei Kontaktbelastung durch ein für Kugel korrektes Hertz Gesetz modelliert [96]. Hier nutzten wir den durch Gleichung (5.2) definierten linearen Verlauf für $\xi < \xi_{\text{el}}$ als Be- und Entladungszweig. Größere Deformationen führen zu plastischem Fließen und Entladen sich entlang des elastischen Zweiges gemäß Gl. (5.3) mit deformationsabhängiger Steifigkeit.

Die Partikelgröße bedingt, dass Adhäsionskräfte ($F_n < 0$) sowohl im unverfestigten, als auch im zementierten Fall berücksichtigt werden müssen. Ist die Kontaktzeit klein gegen die Verfestigungszeit, wirken wahrscheinlich van-der-Waals-Kräfte der Kontakttrennung entgegen, während im zementierungsbestimmten Grenzfall eine Feststoffbrücke die Partikel in Kontakt hält. Die Zeitverfestigung von Kaliumchlorid folgt auf makroskopischer Skala einer exponentiell sättigenden Funktion [33, 215], weshalb davon auszugehen ist, dass das Wachstum der Feststoffbrücken zwischen Partikeln beschränkt ist. Ohne einen speziellen Verfestigungsmechanismus zu spezifizieren, modellieren wir hier phänomenologisch Adhäsionskräfte, indem der Kontaktentladungszweig bis zu einer zeitabhängigen Adhäsionskraft

$$F_{\text{adh}}(t_k) = \sigma_{\text{adh}} A_{\text{adh}} e^{-\frac{t_k}{t_c}} + \sigma_{\text{cem}} A_{\text{cem}} \left(1 - e^{-\frac{t_k}{t_c}}\right) \quad . \quad (5.5)$$

verlängert wird. Dabei sind neben den charakteristischen Spannungen σ_{adh} und σ_{cem} auch effektiv wirkenden Flächen A_{adh} und A_{cem} für die jeweiligen Adhäsionsmechanismen eingeführt worden. Die Zementierung ersetzt laut Gleichung (5.5) auf der Zeitskala t_c die „reguläre“ Adhäsionskraft. Auch wenn es theoretische Abschätzungen zu t_c gibt [33], setzten wir hier die makroskopische Verfestigungszeit gleich der mikroskopischen (siehe [215] für die Diskussion). Basierend auf der van-der-Waals-Wechselwirkung wäre $\sigma_{\text{adh}} A_{\text{adh}}$ durch Hamaker Konstante und Kontaktgeometrie bestimmt [271, 218] und würde von der plastischen Kontaktdeformation abhängen. Ergebnisse aus Simulationen im Rahmen der Kalibrierung zeigten jedoch, dass im adhäsionsbestimmten Grenzfall die effektive Kontaktfläche $A_{\text{adh}} = r_{\text{eff}}^2 (1 + \xi_{\text{max}}/r_{\text{eff}})$ den experimentellen Befund besser reproduziert. σ_{adh} wird als Fitparameter benutzt. Im zementierungsbestimmten Grenzfall muss die Feststoffbrücke mit Querschnittsfläche A_{cem} zur Kontakttrennung überwunden werden, d.h. die Zugkraft muss eine plastische Deformation dieser erwirken. Aus diesem Grund setzen wir $\sigma_{\text{cem}} = \sigma_{\text{pl}}$ und den Brückenquerschnitt proportional zur Kontaktfläche $A_{\text{cem}} = \chi r_{\text{eff}} \xi_{\text{max}}$. χ fungiert hierbei als Kalibrierungsparameter für den zementierungsbestimmten Grenzfall da die verbackene Kontaktfläche nicht notwendiger Weise mit der mechanisch vordefinierten Kontaktfläche der Kugeln übereinstimmt.

Eine korrekte Modellierung der Tangentialkraft zwischen elastischen Kugeln unter Berücksichtigung von Reibung erfordert ein komplexes Kraft-Deformations Gesetz [90]. Selbst im statischen Fall hängt die Steifigkeit vom Überlapp der Partikel in Normalrichtung [144], der Kontaktvorgeschichte und sogar der Richtung der Auslenkung ab [272]. Meist findet nur ein stark vereinfachtes Kontaktmodell Anwendung [108]. Im Gegensatz zur Normalkraft kann die Modellierung der Tangentialkraft auf keine experimentellen Befunde zurückgreifen, sodass nur die wesentlichen Merkmale von Reibung hier berücksichtigt werden [146]. Die implementierten Tangentialkräfte stützen auf das von Luding [100] vorgeschlagene Modell (siehe auch Kap. 4.1.1). Eine lineare,

viskoelastische Feder verhindert das Gleiten der Partikel, solange das Coulomb Kriterium $|\underline{F}_t| \leq \mu|F_n + F_{adh}(\xi_{max}, t_k)|$ erfüllt ist. Im dynamischen Fall wirkt die konstante Kraft $|\underline{F}_t| = \mu|F_n + F_{adh}(\xi_{max}, t_k)|$ der Gleitbewegung entgegen, dabei setzen wir den dynamischen und statischen Reibungskoeffizienten gleich. Coulomb Reibung verursacht auch ein Drehmoment, das auf beide Partikel wirkt. Weitere Drehmomente verhindern die Roll- und Torsionsbewegung der Partikel solange das Coulomb-artige Kriterium $|\underline{M}^{(roll)/(tor)}| \leq \mu_{r/tor} r_{eff}^* |F_n + F_{adh}(\xi_{max}, t_k)|$ erfüllt ist. Hierbei ist r_{eff}^* der um den Überlapp korrigierte effektive Radius der Partikel. Eine detaillierte Beschreibung der Implementierung ist in [100] zu finden. Das Modell zur Rollreibung wurde für den zweidimensionalen Fall in Kap. 4.1.1 detaillierter erklärt.

5.3. Wahl der Parameter und Kalibrierung

5.3.1. Materialparameter

Einige der im Kontaktmodell verwendeten Parameter sind durch die experimentelle Charakterisierung der Partikel vorgegeben. So zum Beispiel die plastische Fließgrenze, welche mit Nanoindentationsversuchen bestimmt worden ist. Aufgrund viskoser Effekte und der Genauigkeit der Nanoindentationsmessung ist die Bestimmung der Steifigkeit für Ent- und Wiederbelastung des Kontaktes nicht möglich. Da diese Steifigkeit den Zeitschritt diktiert, nutzten wir das Young-Modul von Kaliumchlorid für σ_{el} , welches σ_{pl} um einen Faktor 100 überschreitet. Ferner soll die viskose Kraft $F_{vis} = 1.9\sqrt{m_{eff} \sigma_{el} L_{el}} \dot{\xi}$ den elastischen Zweig des Kontaktmodells dämpfen, wobei m_{eff} die reduzierte Masse der Partikel in Kontakt darstellt. Indem der elastische Entladungszweig nicht kritisch gedämpft wird, soll eine überdämpfte Dynamik vermieden werden (siehe dazu auch Kap. 4.1.1 und 4.2). Die restlichen Parameter der Normalkraft F_n , σ_{adh} und χ beschreiben die attraktive Wechselwirkung der Partikel und werden durch Vergleich mit makroskopischen Messungen kalibriert (Abschnitt 5.3.5 und 5.3.6).

5.3.2. Partikelform

Die Modellierung von KCl Partikel durch Kugeln ist eine grobe Näherung, die positive Auswirkungen auf die Laufzeit der Simulationen hat (Berechnung des Partikelüberlapps). Dennoch kann die Partikelform über Reibungskräfte berücksichtigt werden. Dies betrifft im Speziellen die Rollreibung, da Polyeder nicht so einfach wie eine Kugel über eine glatte Fläche rollen können. Des Weiteren implizieren nichtrunde Partikel Kontaktdrehmomente, welche signifikanten Einfluss auf Struktur und Mikro-mechanik des Schüttguts haben [238, 151], sodass Rollreibung an Relevanz gewinnt. Hier interpretieren wir den Rollreibungskoeffizient als Formparameter und benutzten

den von Estrada et al. [157] vorgeschlagen Ansatz, um dessen Wert festzulegen. Die dissipierte Energie bei einer vollen Umdrehung der Kugel auf einer glatten Fläche

$$\mathcal{W}_{\text{Kugel}} = \int_0^{2\pi} \mu_r \frac{d}{2} |\underline{F}_n| d\varphi = 2\pi \mu_r \frac{d}{2} |\underline{F}_n| \quad , \quad (5.6)$$

soll der Arbeit entsprechen, welche benötigt wird um ein Polyeder zu rotieren und dabei den Schwerpunkt über seine Kanten zu heben:

$$\mathcal{W}_{\text{poly}} = \sum_i \left(\int_{\phi_0}^{\pi} |\underline{S}_i \times \underline{F}_n| d\phi \right) \quad , \quad (5.7)$$

wobei ϕ den Winkel zwischen Normalkraft \underline{F}_n und Hebelarm \underline{S}_i zum Knoten i beschreibt (siehe Abb. 5.4(a)). Es wird nur Arbeit zum Heben des Schwerpunktes berücksichtigt. Die Integration endet bei $\phi = \pi$ und Knoten bei welchen der Schwerpunkt bereits vor dem Drehpunkt liegt, verworfen. Mit Hilfe konvexer Polygone, die um die 2D Projektion der Partikel gefittet werden (siehe Abb. 5.4(b)) und des Flächenschwerpunktes dieser Polygone ergibt sich $\mu_r = 0.48$ (Standardabweichung ± 0.04).

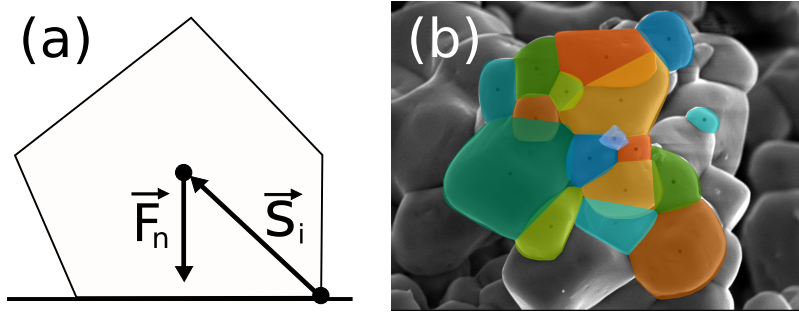


Abbildung 5.4.: Konvexes Polygon mit am Schwerpunkt angreifender Normalkraft und Hebelarm zum Knotenpunkt i (a). SEM Bild verbackener Partikel (Hintergrund), deren 2D Projektionen durch konvexe Polygone dargestellt wird (b).

Die Näherung der Partikelform durch Polyeder, bzw. der Fit der 2D Projektionen durch Polygone kann auch zur Festlegung der Tangentialsteifigkeit k_t verwendet werden. Diese Methode basiert auf der Kontaktmechanik elastischer Partikel die mit einem linearen Federmodell wechselwirken [89], ermöglicht eine zusätzliche Berücksichtigung der Partikelform und ist äquivalent zu dem weit verbreiteten Ansatz $k_t = 2/7 k_n$ zu setzen [146, 108]. Grundlage bildet die Verwendung des Trägheitsmoments der Partikel, um die Schwingungsdauer in Normal- und Tangentialrichtung beim schiefen Stoß zwischen rotierendem Partikel und Ebene zu erzwingen (siehe [89] sowie Kap. 4.1.1, Gl. (4.10)). Auf Basis dieses Ansatzes und der Erkenntnis, dass der exakte Wert der Tangentialsteifigkeit wenig Einfluss auf das Fließverhalten granularer Materie hat [72], nutzten wir das Trägheitsmoment der extrahierten Polygone bzgl. ihres Schwerpunktes und setzten $k_t \approx 0.548 \sigma_{el} \langle d \rangle$. Mit der Abschätzung L_{el} durch $\langle d \rangle$ wird eine variable Tangentialsteifigkeit vermieden. Die gleiche Steifigkeit wird für die Roll- und Torsionsreibungsfeder

verwendet. Um tangential Schwingungen zu unterbinden, werden alle Federn viskos gedämpft (Dämpfungskonstante $2\sqrt{k_t m_{\text{eff}}}$).

Die Reibungskoeffizienten für Gleit- (μ) und Torsionsbewegung (μ_{tor}) lassen sich nicht aus der Partikelform bestimmen. Beide Reibungskoeffizienten sind miteinander verknüpft, da die Torsionsbewegung als Gleiten zweier Partikel um ihre Kontaktnormale interpretiert werden kann. Da weder die korrekte Druckverteilung in der Kontaktfläche gegeben ist noch für alle Kontakte die gleiche Kontaktgeometrie angenommen werden kann, setzten wir $\mu_{\text{tor}} = \mu$ (auch wenn die Torsionsreibung dadurch überschätzt wird [273]). Sowohl Gleit- als auch Rollreibung haben großen Einfluss auf das Fließverhalten des Schüttguts [238, 208]. In diesem Modell ist μ_r durch die Partikelform bestimmt, sodass der Coulomb Reibungskoeffizient zur Kalibrierung verbleibt.

5.3.3. Kalibrierungssimulationen

Zur Charakterisierung des Fließverhaltens von Schüttgütern können diverse Versuchsaufbauten genutzt werden [75]. Abhängig von Versuchsaufbau und sogar durchführendem Experimentator können die Messergebnisse starken Schwankungen unterliegen. In [215] wurde eine Ringscherzelle zur Bestimmung des Fließorts von Kaliumchlorid verwendet. Diese zeichnet sich durch den unbegrenzten Scherweg aus. Aufgrund der großen Varianz bei der Bestimmung der Abscherpunkte soll im Folgenden wenn möglich nur der Anschervorgang (der kritische Zustand) zu Kalibrierung der verbleibenden Parameter genutzt werden. Dies ist für μ und σ_{adh} möglich. χ bestimmt die Zementierungsstärke der Probe und kann somit nur durch Bruchversuche, d.h. Abschervorgänge bestimmt werden. Um den experimentellen Aufbau in den Simulationen abzubilden, führen wir planare Scherung mit Wänden in y -Richtung und periodischen Randbedingungen senkrecht zur y -Richtung durch. Auf den Wänden sitzen Mitnehmern, deren Höhe $x_{50,3}$ überschreitet, sodass Wandreibung eine Untergeordnete Rolle spielt. Die obere Wand (Masse $\approx N \langle m \rangle$) ist in y -Richtung druckgesteuert (σ) und geschwindigkeitsgesteuert in x -/ Scherrichtung (siehe Abb. 5.5, links). Wie im Experiment wird die Schubspannung an der oberen Wand gemessen. Die untere Wand ist unbeweglich (Masse $\rightarrow \infty$). Alle Schersimulationen wurden mit $N = 9000$ Partikeln in einer Scherzelle der Breite $L_x = 20 x_{50,3}$ und Tiefe $L_z = 10 x_{50,3}$ durchgeführt, sodass die minimale Scherzellenhöhe $L_y \geq 26 x_{50,3}$ nicht unterschreitet. Der mittlere Partikeldurchmesser dient im Folgenden als natürliche Längeneinheit ($x_{50,3} \equiv \langle d \rangle$). Die experimentelle Partikelgrößenverteilung wurde durch eine logarithmische Normalverteilung angenähert und gemäß der resultierenden Wahrscheinlichkeit wurden Partikel gezogen, jedoch nur Durchmesser $0.7 \leq d/x_{50} \leq 1.25$ für die Simulation verwendet. Die Experimente werden quasistatisch durchgeführt. Um die Quasistationarität in den Simulation zu gewährleisten, nutzten wir $\dot{\gamma} \sqrt{m/(\langle d \rangle \sigma)} < 10^{-3}$ (ähnlich [62]). Durch Simulationen mit der doppelten und halben Scherrate wurde sichergestellt, dass die Ergebnisse nicht geschwindigkeitsabhängig sind.

Die experimentellen Daten offenbaren, dass die charakteristische Verfestigungszeit von Kaliumchlorid (≈ 15 min) viel größer als die simulierte Scherzeit (≈ 0.1 s) ist. Zeitver-

festigung kann somit während einer Simulation vernachlässigt werden. Im Gegensatz zur variablen Verfestigungszeit im 2D-Modell (Kap. 4.1.1 und 4.6) definiert hier die Präparation durch die initiale Kontaktdauer/Lagerungszeit vor Beginn der Scherung ein *adhäsions-* und ein *zementierungsbestimmtes* Regime. Im zementierungsbestimmten Grenzfall ist dementsprechend davon auszugehen, dass während der Scherung keine neuen Feststoffbrücken entstehen. Entstehende Kontakte erfahren aufgrund von σ_{adh} dennoch eine Adhäsionskraft.

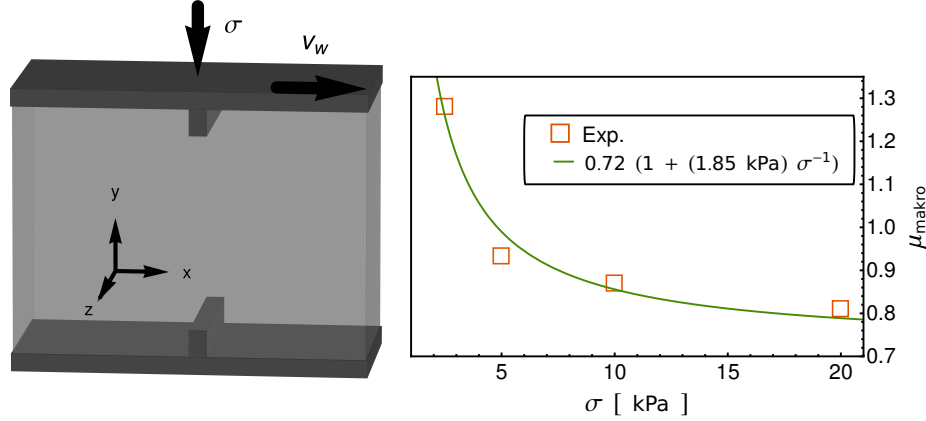


Abbildung 5.5.: Links: Skizze der Scherzelle. Rechts: Experimentell ermittelter makroskopischer Reibungskoeffizient in Abhängigkeit der Normallast σ und ein Fit des Modells für den makroskopischen Reibungskoeffizienten des kritischen Zustands mittels Gleichung (5.8).

Um eine eindeutige Parameterwahl bei minimalem Rechenaufwand zu ermöglichen sind Simulationen von Vorteil, in denen die zu kalibrierenden Parameter unabhängig voneinander bestimmt werden können. Wie im Folgenden erklärt wird, ist eine serielle Kalibrierung der Parameter möglich. χ ist aufgrund der großen charakteristischen Verfestigungszeit ausschließlich für zementierte Proben relevant, sodass im adhäsionsbestimmten Grenzfall nur σ_{adh} und μ berücksichtigt werden müssen. Beide Parameter sollen mit Hilfe des makroskopischen Reibungskoeffizienten des kritischen Zustands bestimmt werden. Dieser wird in den Simulationen durch zeitliches Mitteln ($\dot{\gamma} \Delta t > 2$) während des stationären Fließens gewonnen. Die in den folgenden Abschnitten dargestellten Fehlerbalken entsprechen der Standardabweichung. Der makroskopische Reibungskoeffizient des kritischen Zustands wird meist als konstant angenommen [11], d.h. die Projektion der kritischen Zustandslinie in die $\sigma\tau$ Ebene des Zustandsdiagramm nach Roscoe entspricht einer Ursprungsgerade (vgl. Kap. 2.1.2). Diese Modellvorstellung basiert auf dem sog. *cam clay* Modell [274, 245] und ist nur für kohäsionslose Materie korrekt. Für Kaliumchloridpulver zeigt sich eine adhäsionskraftbedingte Lastabhängigkeit, welche wir im Folgenden nutzen, um μ und σ_{adh} unabhängig voneinander zu kalibrieren. Ähnliches wurde für Kalkstein-Pulver berichtet [275]. Auch Luding und Alonso-Marroquín [276] zeigten, dass die kritische Zustandslinie für kohäsive Pulver keiner Ursprungsgeraden entsprechen muss. Inspiriert durch die Mohr-Coulomb-Theorie (siehe Kap. 2.1.2) inkludieren wir einen makroskopischen Kohäsionsterm in die kritische Zustandslinie und modellieren den makroskopischen Reibungskoeffizienten durch

$$\mu_{makro} = \tau/\sigma = \mu_{cs} + \mathcal{C}^*/\sigma \quad , \quad (5.8)$$

wobei \mathcal{C}^* (im Gegensatz zu Mohr-Coulomb) einen lastunabhängigen Kohäsionsparameter und μ_{cs} den Reibungskoeffizienten der kritischen Zustandslinie beschreibt. Der experimentelle Befund und einen Fit von Gleichung (5.8) sind in Abb. 5.5 (rechts) dargestellt. Im Grenzfall großer Normalspannungen ergibt sich ein makroskopischer Reibungskoeffizient von $\mu_{cs} \approx 0.72$. In diesem Modell verschwindet der Einfluss makroskopischer Kohäsion im Limes großer Normallasten und motiviert die lastkraftunabhängige Adhäsionskraft des Kontaktmodells. Darüber hinaus impliziert Gl. (5.8), dass μ_{makro} im stationären Zustand mit $\sigma_{\text{adh}} = 0$ der Konstanten μ_{cs} entspricht. Dies Szenario dient im Folgenden der Kalibrierung von μ , wobei $\sigma = 200$ kPa verwendet wird um einem möglichen Einfluss der Struktur in diesem Limes näherungsweise gerecht zu werden. Nach Bestimmung des mikroskopischen Reibungskoeffizienten kann σ_{adh} mit einem bestimmten Normalspannungsniveau ($\sigma = 5$ kPa) kalibriert werden.

Im Falle endlicher Lagerungszeit vor der mechanischen Belastung muss die Verbackung von Kontakten berücksichtigt werden. Während die Partikelform (und damit χ) durch den Mahlvorgang bestimmt wird, hängt t_c von Umwelteinflüssen wie Temperatur und Luftfeuchtigkeit ab [33, 263, 261, 264]. Wir kalibrieren χ im Limes $t_k \gg t_c$, d.h. mit einem vollständig verbackenen Pulver. Während der simulierten Scherdauer (≤ 0.1 s) kann Zeitverfestigung vernachlässigt werden, d.h. verbackene Kontakte brechen irreversibel (ähnlich zementierter granularer Materie). Aufgrund der ausgeprägten Präparationsabhängigkeit [41, 128] wird das experimentelle Protokoll nachgestellt: Die Probe wird bis zum Eintreten des kritischen Zustand geschert und anschließend unter äquivalenter Hauptspannung in einer Klimakammer gelagert. I.d.R. wird hierzu die größte Hauptspannung abgeschätzt und als Normalspannung ohne Scherlast verwendet. Die Lagerung als solche kann in den Simulationen durch einfaches Setzen der Kontaktzeiten auf Werte $t_k \gg t_c$ realisiert werden. Unter einer bestimmten reduzierten Normallast σ_{fail} wird diese verbackene, überverfestigte Probe anschließend abgeschert. Zum Bruch der verbackenen Probe muss ein Schubspannungsmaximum τ_{fail} überwunden werden. Der entsprechende Reibungskoeffizient $\tau_{\text{fail}}/\sigma_{\text{fail}}$ wird zur Kalibrierung von χ verwendet.

5.3.4. Kalibrierung des Gleitreibungskoeffizienten μ

In der Reihenfolge sukzessiv zu kalibrierender Parameter wird zuerst der Gleitreibungskoeffizient bestimmt. Abb. 5.6 (links) zeigt den makroskopischen Reibungskoeffizienten des stationären Zustands in Abhängigkeit von μ . Im Einklang mit der Literatur [207, 62, 118] steigt die makroskopische Reibung rasch für kleine μ und zeigt ein Sättigungsverhalten für $\mu > 0.45$. Aufgrund der zunehmenden Fluktuationen ist jedoch nicht eindeutig zu bestimmen, ob die Daten einer exponentiellen Sättigung gehorchen [207] (Fit in der Abb.), oder ein weiteres lineares Regime mit deutlich geringerer Steigung ab $\mu \geq 0.45$ beginnt. Ein Plateau als dritte Option für dieses Regime ist eher unwahrscheinlich, wie weitere Messgrößen im Folgenden offenbaren. Unabhängig vom genauen funktionellen Zusammenhang zwischen mikroskopischer und makroskopi-

scher Reibung reproduziert $\mu = 1$ im Rahmen der Messgenauigkeit den experimentell bestimmten Wert.

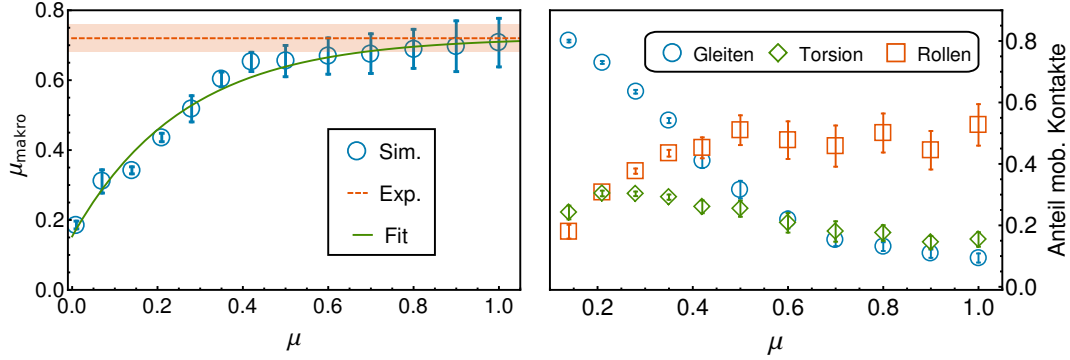


Abbildung 5.6.: Makroskopischer Reibungskoeffizient (links) und Mobilisierung (rechts) als Funktion des Gleitreibungskoeffizienten μ .

Um den Einfluss der Reibungskoeffizienten auf das makroskopische Verhalten des Schüttguts zu verdeutlichen, wurde der Anteil mobilisierter Kontakte untersucht (Abb. 5.6, rechts), d.h. das Verhältnis aus Anzahl mobilisierter Kontakte zur Anzahl aller Kontakte. Differenziert wurde zwischen Gleit-, Roll- und Torsionsmobilisierung, wobei ein Kontakt mobilisiert ist, wenn $|\underline{F}_t|/(\mu|F_n + F_{\text{adh}}|) = 1$, bzw. $|\underline{M}^{(\text{roll})/(\text{tor})}|/(\mu_{\text{r/tor}} r_{\text{eff}}^* |F_n + F_{\text{adh}}|) = 1$ für Roll- oder Torsionsbewegung. Zwei verschiedene Effekte können für größer werdendes μ beobachtet werden. Bis $\mu \leq \mu_r$ nimmt der Anteil rollmobilisierter Kontakte zu und ist näherungsweise konstant für größere Gleitreibungskoeffizienten. Im Gegensatz dazu sinkt der Anteil gleitender Kontakte bis $\mu \leq 0.8$. Dies erklärt die Charakteristik der Funktion $\mu_{\text{makro}}(\mu)$. Solange Gleiten die bevorzugte Mobilisationsmode darstellt, hat eine Erhöhung des Gleitreibungskoeffizienten massiven Einfluss auf den makroskopischen Reibungskoeffizienten. Sobald Rollen gegenüber Gleiten bevorzugt wird ($\mu > \mu_r$), verschwindet der Einfluss von μ beinahe und es kann ein μ_r -abhängiges quasi-Plateau der makroskopischen Reibung beobachtet werden [208]. Die fortwährende Abnahme gleitender Kontakte für $\mu > 0.45$ widerspricht hingegen einem richtigen Plateau in Abb. 5.6 (links) für höhere Gleitreibungskoeffizienten. Torsionsreibung scheint keinen Einfluss auf den makroskopischen Reibungskoeffizienten zu haben.

Eine Strukturanalyse offenbart weitere Details zum Einfluss des Gleitreibungskoeffizienten. Zu diesem Zweck betrachten wir die mechanische Koordinationszahl Z_{mech} (siehe Gl. (2.21)) welche berücksichtigt, dass nicht alle Partikel zur Stabilisierung des Kontaktnetzwerks beitragen, sog. *Rattler*. Da wir in diesem Kapitel hohe Reibungskoeffizienten und ein kohäsives Material betrachten, können prinzipiell auch Partikel mit zwei Kontakten zum Kraftnetzwerk beitragen. Der rechte Graph in Abb. 5.7 zeigt die mechanische Koordinationszahl in Abhängigkeit des Gleitreibungskoeffizienten. Bei verschwindendem μ wird eine Koordinationszahl nahe sechs beobachtet. Ein Wert, der für ein monodisperses, reibungsloses System im statischen Gleichgewicht zu erwarten ist [277, 76]. Z_{mech} nimmt mit steigendem Gleitreibungskoeffizienten ab und sättigt bei ≈ 3.1 . In diesem Regime ist Gleiten fast vollständig unterdrückt (Abb. 5.6, rechts), nur

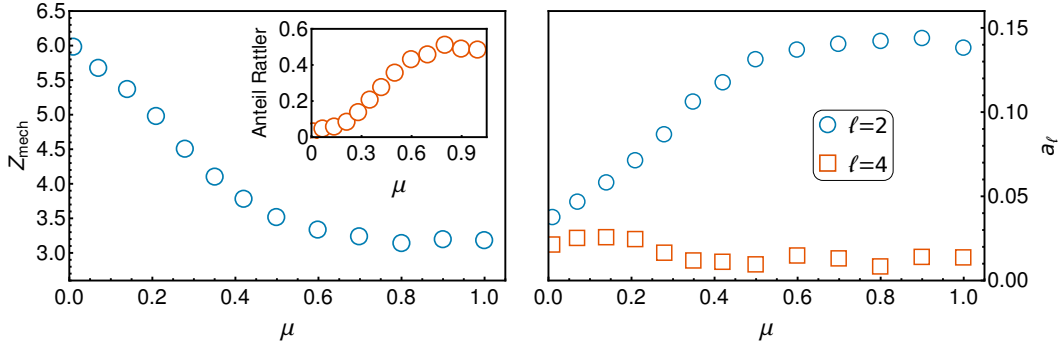


Abbildung 5.7.: Links: Mechanische Koordinationszahl. Inset: Anteil an Rattlern. Rechts: Anisotropie der Kontaktorientierungsverteilung als normierter Beitrag der Ordnung ℓ bei Näherung durch Kugelflächenfunktionen.

Kontakte mit kleiner Normallast sind noch mobilisiert (nicht gezeigt). Sofern bei jedem Kontakt vier Freiheitsgrade unterdrückt werden (einer in der Normalbewegung, zwei in der Translationsbewegung und einer in der Rotationsbewegung um die Kontaktnormale), ist eine Koordinationszahl von drei im statischen Gleichgewicht einer monodispersen Konfiguration zu erwarten. Aufgrund der Polydispersität des Systems und der unvollständigen Unterdrückung aller gleitenden Kontakte ist das Ergebnis durchaus plausibel. Mit Zunahme von μ steigt die Anzahl der Rattler (Inset von Abb. 5.7 links) und bestätigt damit, dass zunehmend weniger Partikel am mechanischen Kontaktnetzwerk partizipieren. Beide Graphen zeigen ein Plateau bei $\mu \geq 0.8$.

Neben der Koordinationszahl wurde auch die Anisotropie der Kontaktverteilung untersucht. Zu diesem Zweck nähern wir die Kontaktdichte auf der Einheitssphäre durch Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ (siehe auch [121]) und fassen die Koeffizienten $c_{\ell m}$ der Ordnung ℓ durch

$$a_\ell = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_m |c_{\ell m}|^2} \quad , \quad (5.9)$$

zusammen, wobei der Vorfaktor der Normierung gilt. Wie schon im 2D-Fall (Kap. 4) verschwinden ungerade Beiträge (ℓ) aufgrund der Symmetrie $n(-\underline{r}) = n(\underline{r})$. Wir beschränken uns auf die ersten beiden Terme $\ell = 2$ und $\ell = 4$ ($a_0 = 1$ ist aufgrund der Normierung der Kontaktverteilung konstant), siehe Abb. 5.7 rechts. Analog zum makroskopischen Reibungskoeffizienten lassen sich in der Funktion $a_2(\mu)$ zwei Regime identifizieren, welche durch $\mu \approx 0.45$ getrennt werden. Der $\ell = 2$ Beitrag zur Näherung der Kontaktverteilung entspricht einer hantelähnlichen Form und dominiert mit zunehmender Gleitreibung die Kontaktverteilung. Der Winkel zwischen der Symmetrieachse der Hantel und der $(1, -1, 0)$ Richtung entspricht dabei $\approx 5^\circ$. Während a_2 die Anisotropie der Kontaktverteilung für große Reibungskoeffizienten hinreichend genau beschreibt, wird der Beitrag vierter Ordnung (a_4) bei $\mu < 0.2$ relevant. Die Hantel-Achse bleibt auch hier als Symmetrieachse erhalten.

5.3.5. Kalibrierung von σ_{adh} : Der Adhäsionsbestimmte Grenzfall

Die Bestimmung von σ_{adh} stellt den nächsten Schritt im Kalibrierungsprozesses dar. Aufgrund der Normallastabhängigkeit nutzen wir hierzu das Spannungsniveau $\sigma = 5 \text{ kPa}$. Mit der Normalkraft $F_{\text{adh}} \approx \sigma_{\text{adh}} \langle r_{\text{eff}} \rangle^2$ entspricht der untersuchte Parameterbereich einer Kohäsionszahl $\eta = F_{\text{adh}} / (\sigma \langle d \rangle^2)$ zwischen 0.25 und 25.

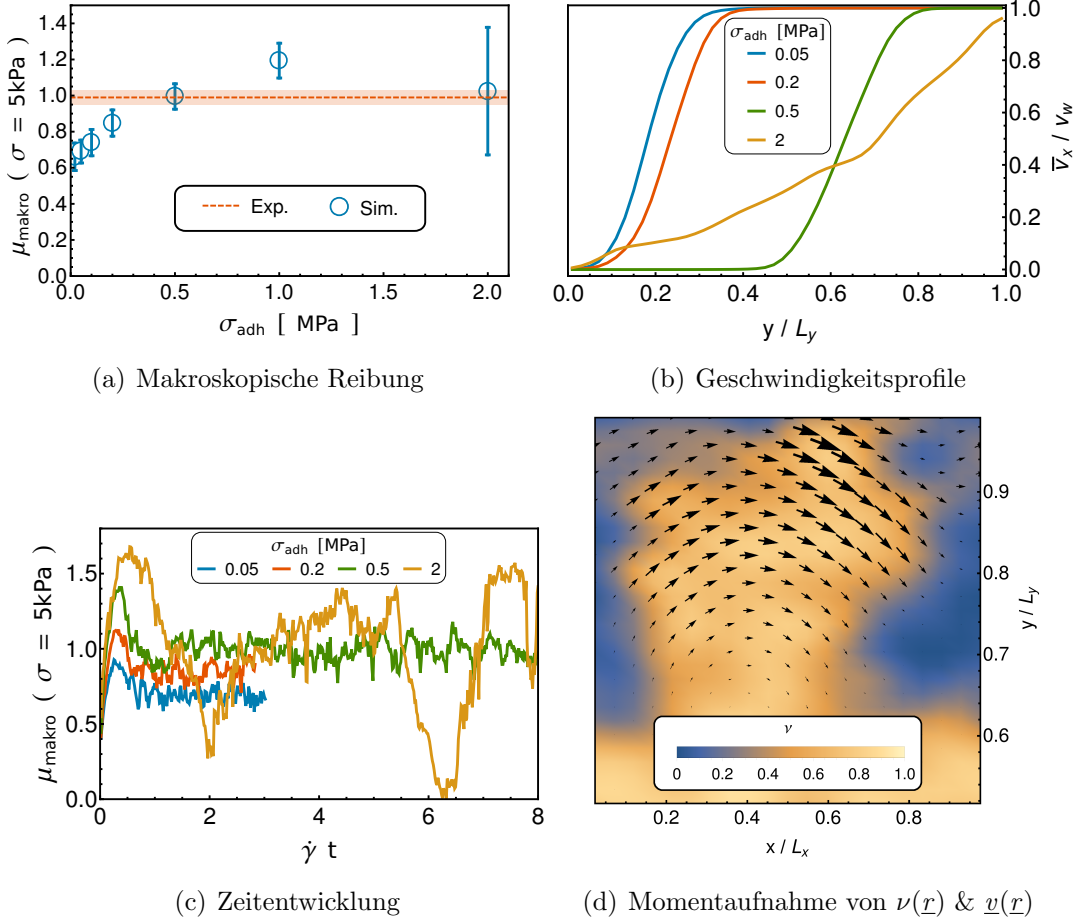


Abbildung 5.8.: Makroskopischer Reibungskoeffizient als Funktion der Adhäsionsspannung (a). Zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsprofile für verschiedene Adhäsionsspannungen (b). Zeitlicher Verlauf des makroskopischen Reibungskoeffizienten (c) und Momentaufnahme des Dichte- und Geschwindigkeitsfeld (Pfeile) für $\sigma_{\text{adh}} = 2 \text{ MPa}$ bei $\dot{\gamma} t \approx 6.1$ (d).

Abb. 5.8(a) zeigt den zeitlich gemittelten makroskopischen Reibungskoeffizienten des stationären Fließens als Funktion der Adhäsionsspannung σ_{adh} . Im Einklang mit der Literatur [278, 64] steigt μ_{makro} linear mit zunehmender Adhäsionskraft, zeigt aber einen überraschenden Abfall bei $\sigma_{\text{adh}} = 2 \text{ MPa}$. Grund dafür ist das Abrollen von Partikelclustern, welches mit einem Spannungsabfall einhergeht (siehe Abb. 5.8(c) und 5.8(d)). Während sich bei Adhäsionsspannungen $\sigma_{\text{adh}} \leq 0.5 \text{ MPa}$ ein stationäres Scherband mit σ_{adh} -unabhängiger Breite ausbildet (Abb. 5.8(b)) ist das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsprofil für $\sigma_{\text{adh}} = 2 \text{ MPa}$ stückweise linear, das Resultat zweier Clusterro-

tationen. Ein Zusammenhang mit dem in 2D beobachteten „Agglomerationsübergang“ ($\sigma_{\text{adh}} = 1 \text{ MPa} \Leftrightarrow \eta \approx 12.5$, siehe Kap. 4.2 und 4.5) ist naheliegend. Die Clustergröße entspricht hier jedoch der Systembreite und ist nicht $\leq 10 \langle d \rangle$, sodass auch ein Finite-Size-Effekt in Betracht kommt. Zur genauen Beurteilung des Ursprungs der Clustergröße sind weitere Untersuchungen notwendig. Der experimentell gemessene makroskopische Reibungskoeffizient kann mit einer Adhäsionsspannung von $\sigma_{\text{adh}} = 0.5 \text{ kPa}$ ($\eta \approx 6.3$) reproduziert werden, sodass die Kollektivbewegung in Clustern und mögliche Finite-Size-Effekte vernachlässigt werden können. Darüber hinaus kann mit Hilfe der kalibrierten Adhäsionsspannung der Einfluss der Gravitationskraft abgeschätzt werden. Dazu wird die granulare Bondzahl verwendet, definiert als Verhältnis aus Adhäsions- und Gravitationskraft [228]. Hier beträgt die Bondzahl 10^5 und rechtfertigt somit die Vernachlässigung der Gravitation in den Simulationen.

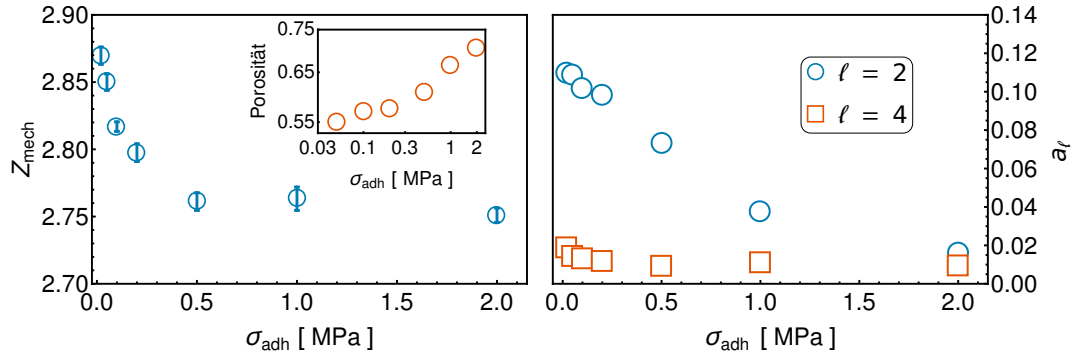


Abbildung 5.9.: Mechanische Koordinationszahl (links) und Anisotropie als Funktion der Adhäsionsspannung (rechts).

Die Änderung der Struktur, quantifiziert als Koordinationszahl und Anisotropie des Kontaktnetzwerks, ist in Abb. 5.9 dargestellt. Mit zunehmendem σ_{adh} lockert sich das Kontaktnetzwerk auf, d.h. die Koordinationszahl nimmt ab. Dies steht im Gegensatz zu den Ergebnissen aus Kap. 4.5 (sowie [64]), die eine steigende Koordinationszahl mit steigender Adhäsionskraft zeigten. Es ist wahrscheinlich, dass die bedeutend höheren Reibungskoeffizienten (Gleit- als auch Rollreibung) dieses Verhalten verursachen. Die dennoch beobachtbare Kollektivbewegung zeigt, dass eine steigende Koordinationszahl keine notwendige Bedingung für die Agglomeration von Partikeln zu Clustern darstellt. Es sei angemerkt, dass schon die Einführung von Adhäsionskräften zu einer signifikanten Abnahme der Koordinationszahl führt (vgl. Abb. 5.7 und 5.9). Diese strukturelle Änderung geht einher mit einer Zunahme der Porosität, siehe Inset des linken Graphen in Abb. 5.9. Die unterschiedlichen Steigungen in der doppelt logarithmischen Auftragung sowie die nicht dargestellten Fluktuationen untermauern $\sigma_{\text{adh}} = 1 \text{ MPa}$ als Übergangspunkt zu einer Dynamik des Haufwerks, die durch Cluster bestimmt wird. Im Einklang mit Kap. 4.5 verschwindet die Anisotropie der Kontaktorientierungen mit steigender Adhäsionsspannung (Abb. 5.9, rechts). Neben Zugkräften die Kontakte in $(1, 1, 0)$ Richtung zusammenhalten führt auch die Clusterrotation zu einer homogenen Verteilung von Kontaktorientierungen. Der Beitrag vierter Ordnung nimmt noch weiter ab.

5.3.6. Kalibrierung von χ : Der Zementierungsbestimmte Grenzfall

Wie bereits in Kap. 5.3.3 erklärt, wird die Schubspannung τ_{fail} , welche zum Aufbrechen einer vollständig verbackenen Probe benötigt wird, zur Kalibrierung von χ genutzt. Zur Präparation wird die Probe unter einer Normalspannung von $\sigma_{\text{pre}} = 5$ kPa bis zum stationären Zustand gesichert und anschließend unter der gleichen größten Hauptspannung gelagert. Diese wird mit Hilfe des Spannungstensors

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{L_x L_y L_z} \left(\sum_{\langle i,j \rangle} F_{ij\alpha} r_{ij\beta} + \sum_{N_W} F_{iW\alpha} r_{iW\beta} \right) , \quad (5.10)$$

bestimmt, wobei die zweite Summe alle Wandkontakte N_W berücksichtigt. Der größte Eigenwert $\sigma_{1,\text{pre}} \approx 10.6$ kPa entspricht in etwa dem experimentellen Wert, welcher mit Hilfe des Fließorts abgeschätzt werden kann [215]. Zur Lagerung wird die Wandgeschwindigkeit in Scherrichtung auf Null gesetzt, die Normalspannung auf $\sigma = \sigma_{1,\text{pre}}$ erhöht und das System relaxiert, bis alle Partikel ruhen. Anschließend wird die Kontaktzeit aller Kontakte auf $100 t_c$ gesetzt. Da χ lediglich die maximal wirkende Anziehungskraft zwischen Partikeln beeinflusst und keine Steigung des Kontaktmodells ändert, kann dieser Vorgang für eine ruhende Konfiguration instantan erfolgen. Es entstehen keine neuen Kontakte. Die so präparierte Probe wird anschließend unter einer reduzierten Normalspannung von $\sigma_{\text{fail}} = 3$ kPa bis zum Aufbrechen gesichert. Der durch die maximale Schubspannung definierte Reibungskoeffizient ist in Abb. 5.10 für $\chi \in \{0.5, 1, 2, 4, 8, 16\}$ dargestellt. Hier wird nicht der stationäre Zustand betrachtet, sodass anstatt des zeitlichen Mittels ein Mittel über vier verschiedene Konfigurationen durchgeführt wird. Es zeigt sich ein linearer Anstieg von $\tau_{\text{fail}}/\sigma_{\text{fail}}$ mit χ , wobei die durch lineare Regression bestimmte Steigung 0.83 entspricht und der Achsenschnittpunkt bei 1.2 liegt. Die im Experiment gemessenen Werte können durch $\chi \approx 2.3$ reproduziert werden.

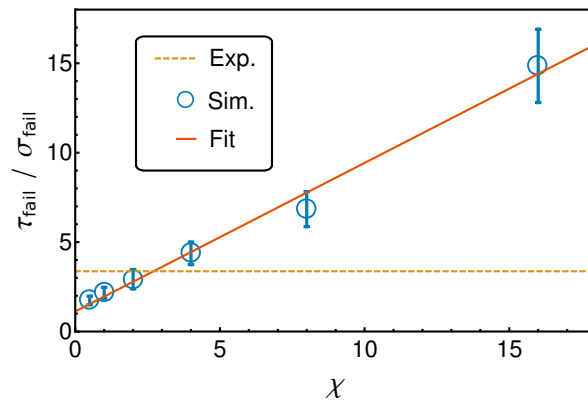


Abbildung 5.10.: Maximaler Reibungskoeffizient beim Aufbrechen einer verbackenen Probe als Funktion des Kontaktgeometrieparameters χ , welcher die verbackene Fläche und damit Stärke der Verbackung modifiziert.

5.4. Validierung

Dieser Abschnitt soll zeigen, dass es mit Hilfe des kalibrierten Kontaktmodells möglich ist, Vorhersagen über das Fließverhalten von Kaliumchlorid zu treffen. Diese Validierung ist nur für das mechanische Verhalten in Scherversuchen gültig. Ob sich andere Experimente ebenfalls mit diesem Kontaktmodell beschreiben lassen, bleibt zu klären. Andererseits wurde die Kalibrierung für spezifische $\mu_{\text{makro}}(t, \sigma_{\text{pre}}, \sigma_{\text{fail}})$ Punkte durchgeführt, sodass eine korrekte Beschreibung aller anderen Punkte nicht trivial ist.

Es wird zunächst der kritische Zustand im adhäsionsbestimmten Grenzfall überprüft. Die Kalibrierung wurde unter einer spezifischen Normallast von $\sigma = 5$ kPa durchgeführt. Der makroskopische Reibungskoeffizient im stationären Zustand zeigt bei Kaliumchlorid eine Normallastabhängigkeit, deren Reproduktion in den Simulationen fraglich ist. Wie in Abb. 5.11 dargestellt, zeigt das Kontaktmodell den gleichen Verlauf $\mu_{\text{makro}}(\sigma)$ und reproduziert den experimentellen Befund. Bemerkenswert ist, dass für die postulierte Modellierung des Reibungskoeffizienten mit Gl. (5.8) eine näherungsweise konstante Adhäsionskraft notwendig ist. Nutzt man eine Adhäsionskraft die proportional zur plastischen Deformation ξ_{max} der Partikel ist, kann dieser Verlauf nicht reproduziert werden.

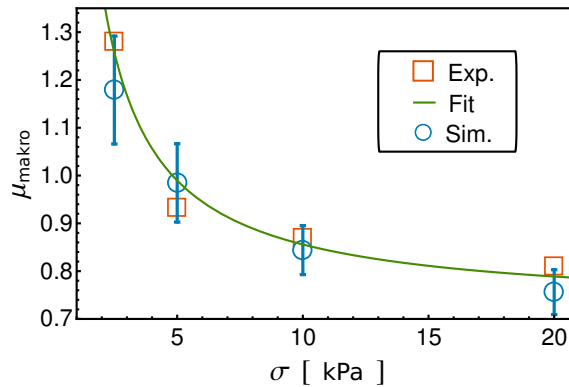


Abbildung 5.11.: Vergleich des makroskopischen Reibungskoeffizienten des stationären Zustands als Funktion der Normalspannung zwischen Experiment und Simulation.

Mit zunehmender Zementierung sinkt die Fließfähigkeit von Kaliumchlorid. Unter Verwendung der Messprozedur aus Abschnitt 5.3.6 bestimmen wir die Zunahme des makroskopischen Reibungskoeffizienten in Abhängigkeit der Lagerungszeit ($\sigma_{\text{pre}} = 5$ kPa, $\sigma_{\text{fail}} = 3$ kPa). Während die Grenzfälle keiner und unendlicher Lagerungszeit kalibriert wurden, ist der Reibungskoeffizient für dazwischen liegende Lagerungszeiten in Abb. 5.12 (links) dargestellt. Die Ergebnisse der Simulation entsprechen dem experimentellen Befund und bestätigen, dass das Bruchverhalten einer zementierten Probe von der Kontaktverbackung auf mikroskopischer Skala bestimmt wird [207]. Dieser Befund ist nicht überraschend, in Anbetracht der Ergebnisse von Abschnitt 5.3.5 aber auch nicht trivial. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Verbackungszeit in den Simulationen vorgegeben wurde.

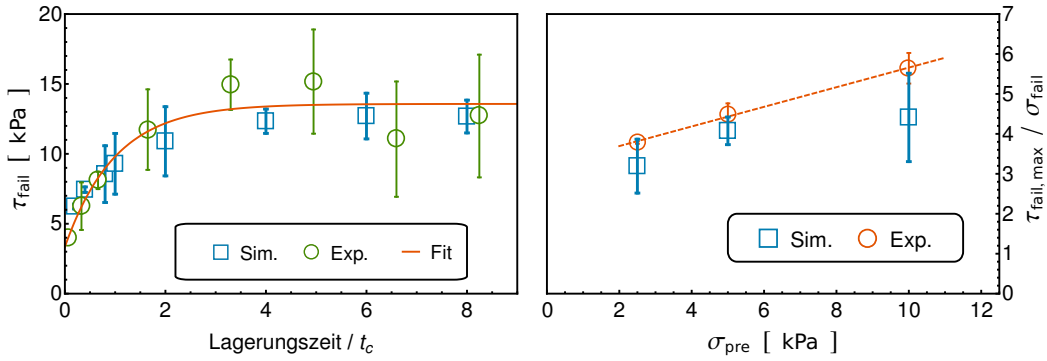


Abbildung 5.12.: Validierung des zementierungsbestimmten Grenzfalls. Links: Maximale Schubspannung in Abhängigkeit der Lagerungszeit. Rechts: Maximum der Schubspannung beim Aufbruch einer verbackenen Probe in Abhängigkeit von der Präparationsspannung.

Als letzten Schritt der Validierung vergleichen wir die Festigkeit verbackener Proben, welche mit unterschiedlicher Anschernormalspannung σ_{pre} (und damit unterschiedlicher Packungsdichte) präpariert worden sind. Gemessen wird die zum Aufbrechen einer verbackenen Probe (Lagerungszeit $\gg t_c$) benötigte Schubspannung $\tau_{\text{fail,max}}$ in Abhängigkeit von σ_{pre} . Da $\sigma_{\text{fail}} = 0.6 \sigma_{\text{pre}}$ als Abschernormalspannung gewählt wurde, nutzten wir das Verhältnis aus maximaler Abscherschubspannung $\tau_{\text{fail,max}}$ und σ_{fail} , um den Präparationseffekt isoliert zu betrachten (Abb. 5.12, rechts). Für KCl, NaCl und ähnliche Materialien wird dieser Zusammenhang mit einem Potenzgesetz mit Exponenten der Ordnung Eins beschrieben [264]. Hier kann der experimentelle Befund durch eine Gerade mit Steigung $\approx 1/4$ genähert werden. Auch wenn dies ein endliches $\tau_{\text{fail,max}}$ im Limes $\sigma_{\text{pre}} \rightarrow 0$ suggeriert, ist zu beachten, dass $\tau_{\text{fail,max}}/\sigma_{\text{fail}}$ bei der angewandten Messprozedur ($\sigma_{\text{fail}} \rightarrow 0$) in diesem Grenzfall nicht definiert ist. Sowohl die mit σ_{pre} steigende Packungsdichte, als auch die zunehmende Abplattung der Kontakte bewirkt die Erhöhung des Reibungskoeffizient mit der Anschernormalspannung. Die Simulationsergebnisse stimmen im Rahmen des statistischen Fehlers (drei Messungen) mit den experimentellen Ergebnissen überein, sodass die Validierung als erfolgreich gewertet wird. Des Weiteren bestätigt dieser Befund die lastabhängige Adhäsionskraft des Kontaktmodells im zementierungsbestimmten Grenzfall.

5.5. Qualitative Analyse des Bruchverhaltens zementierter Proben

Abs. 5.3.5 offenbarte, dass sich im adhäsionsbestimmten Grenzfall stationäre Scherbänder bei der Scherdeformation von Kaliumchlorid ausbilden. In diesem Abschnitt wird die Bruchdynamik zementierter Proben qualitativ untersucht. Dabei beschränken wir uns auf das experimentelle Protokoll zur Probenpräparation. Die bisherigen Ergebnisse zeigten eine Zunahme der Festigkeit mit steigender Lagerungszeit. Die Adhäsionskraft zwischen zementierten Partikeln übersteigt die Adhäsionskraft frisch gemahlener Partikel. Nach Kap. 4.6.1 sind angescherte und anschließend gelagerte Proben

im Bezug auf die Adhäsionskraft $F_{\text{adh}}(t_k \gg t_c)$ überverfestigt. Es soll überprüft werden, ob restzementierte Bruchstücke Dilatanz bewirken [44], initiale Risse stationäre Scherbänder vorgeben [128] und eine Restzementierung erhalten bleibt [128, 241].

Um diese Fragen zu beantworten, nutzen wir das kalibrierte Kontaktmodell und scheren drei verschiedene, zementierte Proben mit $N = 9000$ Partikeln. Alle Proben werden mit einer Anschernormalspannung von $\sigma_{\text{pre}} = 5$ kPa präpariert. Die Lagerung erfolgt mit dem in Abs. 5.3.6 beschriebenen Protokoll, d.h. Entspannung der oberen Wand in Scherrichtung und Erhöhung der Normalspannung auf $\sigma_{1,\text{pre}}$. Sobald alle Partikel zur Ruhe gekommen sind, wird die Kontaktzeit um $10^3 t_c$ erhöht und anschließend unter der Normalspannung $\sigma_{\text{fail}} = \sigma_{\text{pre}} = 5$ kPa abgeschert.

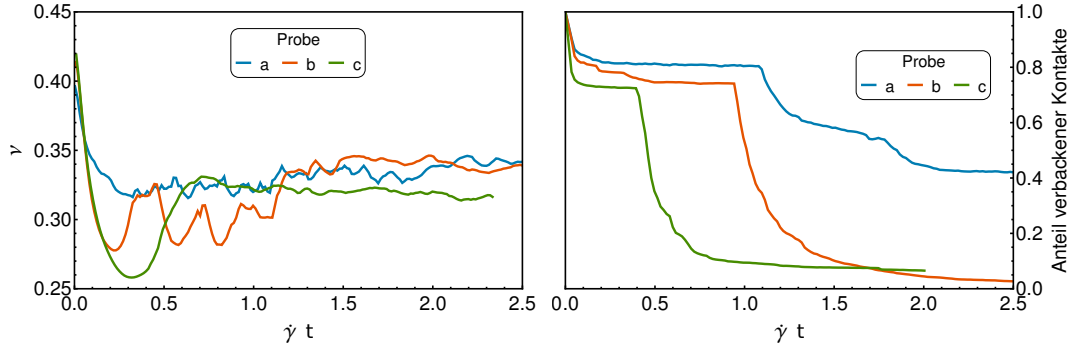


Abbildung 5.13.: Packungsdichte (links) und Anteil verbackener Kontakte (rechts) in Abhängigkeit der Scherdeformation.

Alle drei Proben vergrößern ihr Volumen mit steigender Scherdeformation, wobei ein präparationsabhängiges lokales Minimum durchlaufen wird (Abb. 5.13, links). Auch der Anteil verbackener Kontakte ($t_k > t_c$) zeigt präparationsabhängiges Verhalten (Abb. 5.13, rechts). Proben b und c sind nach einer Deformation von $\dot{\gamma} t = 2$ fast vollständig aufgebrochen (verbackene Kontakte ≤ 10 %), während etwas weniger als die Hälfte aller Kontakte in Probe a noch verbacken sind. Diese unterschiedliche Dynamik könnte auf Dichteinhomogenitäten der Anfangskonfiguration zurückzuführen sein. Zur weiteren Analyse betrachten wir das in z-Richtung gemittelte und vergrößerte Feld der Kontaktzeit als „Flächendichte“

$$\hat{t}_k(\tilde{\underline{r}}) = \frac{1}{L_z} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{k,ij} \Phi(\tilde{\underline{r}} - \tilde{\underline{r}}_i + \tilde{\underline{r}}_{ij}/2, \ell) \quad , \quad (5.11)$$

wobei $\tilde{\underline{r}} = \underline{r} - (\underline{r} \cdot \underline{e}_z) \underline{e}_z$ bezeichnet, d.h. durch eine Tilde angedeutet wird, dass nur die x - und y -Komponente des Vektors berücksichtigt werden. Φ ist eine Gauß-Funktion mit Normierung $1/(2\pi\ell^2)$ und $\ell = 0.5 \langle d \rangle$ die coarse-graining-Länge. Das Feld \hat{t}_k zeigt sowohl Inhomogenitäten der Kontaktdichte, als auch der Kontaktzeit an, wobei eine Differenzierung der beiden nicht möglich ist. Abb. 5.14 zeigt Momentaufnahmen von $\hat{t}_k \langle d \rangle^2 / (10^3 t_c)$ für Proben a und c. Gelbe und weiße Bereiche sind verbacken, während blaue Bereiche geringe Kontaktdichten bzw. unverbackene Kontakte anzeigen. Anfangs

sind alle Kontakte verbacken, sodass bei $\dot{\gamma} t \approx 0.0$ Mitnehmer an den Wänden und Bereiche geringer Kontaktdichte zwischen den hellen Bereichen zu erahnen sind. Während Probe a auf mittlerer Höhe aufreißt und anschließend alle zementierten Kontakte der oberen Hälfte aufgemahlen werden, reißt Probe c vom Mitnehmer der unteren Wand aus näherungsweise parallel zur Symmetrieachse der Hantel (vgl. Abs. 5.3.5). Dabei entsteht ein großes Bruchstück, welches abrollt und anschließend zermahlen wird. Probe b (nicht abgebildet), zeigt auch Risse vom unteren Mitnehmer aus in gleicher Richtung, die sich jedoch nicht durch das gesamte System ziehen.

Folgende Thesen können auf Basis dieser qualitativen Auswertung des Bruchverhaltens formuliert werden:

- Initiale Risse der Probe werden durch die Präparation vorgegeben. Hier diene der stationäre Zustand bei planarer Scherung als Anfangskonfiguration, d.h. es ist davon auszugehen, dass druckbelastete Kontakte in $(1, -1, 0)$ Richtung, zugbelastete senkrecht dazu verlaufen (vgl. Abs. 5.3.4 und 5.3.5 sowie Kap. 4.5). Zugbelastete Kontakte reißen zuerst, demnach sind initiale Risse in $(1, -1, 0)$ Richtung zu finden. Die Größe von Bruchstücken kann sowohl durch die Anfangskonfiguration (Probe a), als auch durch die mechanische Beanspruchung (Probe b und c) vorgegeben werden. Letzteres bedeutet in diesem Fall, dass Mitnehmer und Systemgröße die Größe der Bruchstücke bestimmen.
- Der kritische Zustand dieser Proben gleicht unverbackenem Kaliumchlorid. Lediglich Probe a zeigt nach einer Scherdeformation $\dot{\gamma} t \approx 5.5$ noch eine signifikante Restverbackung. Die Breite des aufgebrochenen Bereichs ist wesentlich größer als Scherbandbreiten des adhäsionsbestimmten Grenzfalles (vgl. Abs. 5.3.5). Es ist davon auszugehen, dass verbackene Kontakte die Scherlokalisierung nicht mehr beeinflussen und das mechanische Verhalten einer unverbackenen Probe gleicht, wie in [128]. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass Probe a für zunehmende Scherdeformation vollständig bricht.

Beide Thesen sollten durch eine systematische Analyse des Aufbrechens zementierter Proben verschiedener Größe und Präparation geprüft werden.

5.6. Zusammenfassung und Diskussion

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass das mechanische Verhalten von Kaliumchloridpulver auf makroskopischer Skala durch DEM Simulationen mit weichen Kugeln vorhergesagt werden kann. Motiviert durch experimentelle Befunde wurde ein Kontaktmodell entwickelt, das eine Vielzahl von Partikelformen durch charakteristische Längenskalen nachbilden kann. Hier wurden die Längenskalen durch eine kreisförmige Kontaktgeometrie motiviert. Weitere wichtige Parameter, welche die makroskopische Reibung beeinflussen, wurden durch Kalibrierung (μ , σ_{adh} und χ) oder mit Hilfe der Partikelform (μ_{r}) bestimmt. Auf Basis des lastabhängigen makroskopischen Reibungskoeffizienten

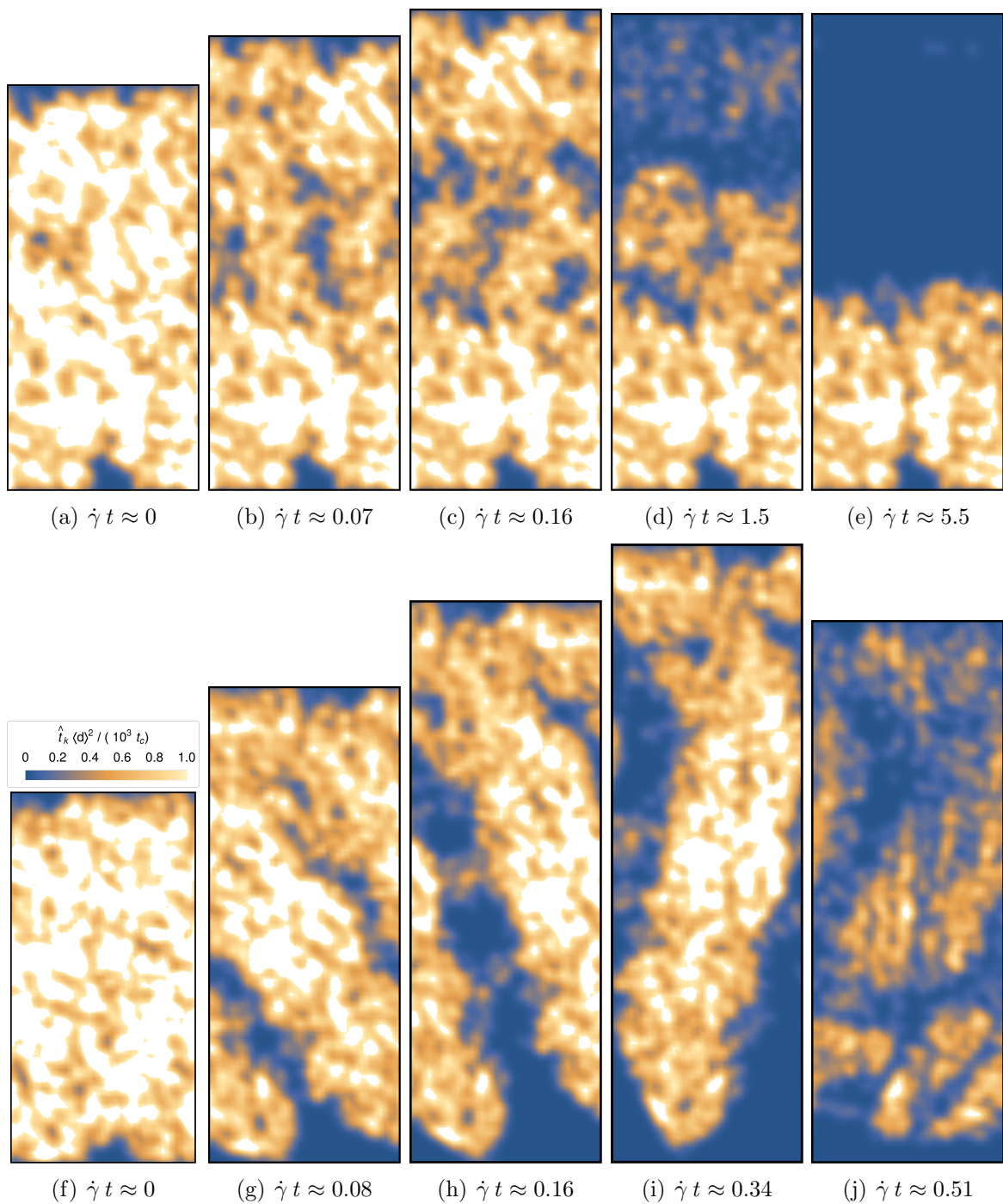


Abbildung 5.14.: Momentaufnahmen der Kontaktzeitflächendichte nach Gl. (5.11) für die Proben a (Bilder (a)-(e)) und c (Bilder (f)-(j)). Die in (f) abgebildete Legende ist für alle Graphen gültig.

im kritischen Zustand (vgl. Gl. (5.8)) wurde ein Methode zur sukzessiven Kalibrierung offener Parameter vorgeschlagen. Diese ermöglichte eine isolierte Betrachtung des Einflusses dieser Parameter auf Struktur und Mobilisierung. Da weder Partikelform noch Partikelgrößenverteilung dem realen Pulver entsprechen, stellt das Schüttgut in

den Simulationen eher ein idealisiertes Partikelensemble mit den gleichen makroskopischen Eigenschaften dar. Die kalibrierten Parameter gleichen sicherlich nicht den realen Wechselwirkungsparametern, sondern kompensieren eher die getroffenen Idealisierungen. Die makroskopische Kohäsion wird beispielsweise sowohl durch die Partikelgröße über die Adhäsionskraft [64, 278] als auch die Partikelgrößenverteilung [176] beeinflusst. Somit ist davon auszugehen, dass die Adhäsionskraftparameter der idealisierten Partikelgrößenverteilung Rechnung tragen. Dennoch orientiert sich der mittlere Partikeldurchmesser an der realen Partikelgröße und es sollen keine meso-, oder vergrößerten Partikel modelliert werden wie in [279]. Kap. 5.3 offenbarte, dass im betrachteten Parameterbereich zwei der mikroskopischen Partikeleigenschaften (σ_{adh} , χ) linear das makroskopische Verhalten des Pulvers beeinflussen (μ_{makro} , τ_{fail}). Selbes gilt, wenn auch nicht überraschend, für die Zeitskala der Verbackung t_c . Dies Ergebnis ist im Einklang mit der Literatur [207]. Dennoch zeigte sich bei der Kalibrierung der Adhäsionsspannung (σ_{adh}) auch ein nicht-linearer mikro-makro Übergang. Hohe Adhäsionskräfte zwischen den Partikeln fördern eine Kollektivbewegung in Clustern oder Bruchstücken. Das Abrollen dieser Cluster verringert die makroskopische Reibung und unterbricht somit den linearen Anstieg von μ_{makro} mit σ_{adh} . Dieser Übergang bei $\eta > 10$ erinnert an die Simulationsergebnisse der zweidimensionalen Systeme (siehe Kap. 4.5 sowie [64]). Hier wird die Clustergröße jedoch durch die Systembreite bestimmt und übertrifft die in 2D beobachteten Längenskalen ($< 10 \langle d \rangle$ für $\eta \leq 80$). Außerdem fällt die Koordinationszahl für steigendes σ_{adh} im Gegensatz zu den Resultaten in 2D, d.h. die Cluster sind locker gepackt. Es liegt die Schlussfolgerung nahe, dass Adhäsionskräfte im hier verwendeten Modell keine neue, intrinsische Längenskala des Schüttguts definieren, sondern die Clustergröße eher durch die äußere mechanische Beanspruchung (Mitnehmer an der Wand haben einen Abstand L_x) bestimmt wird. Dieser Punkt sollte im Rahmen einer Finite-Size-Analyse sowie durch Untersuchung des Einfluss der Wandrauigkeit weiter untersucht werden.

Neben dem mikro-makro-Übergang wurden auch die Struktur des Kontaktnetzwerks und die Kontaktmobilisierung untersucht. Der durch die Partikelform bestimmte Rollreibungskoeffizient μ_r führte im Rahmen der Kalibrierung zu einem Gleitreibungskoeffizient $\mu = 1$. Das Verhältnis aus beiden bestimmt den dominierenden Mobilisationsmechanismus im Haufwerk [208]. Hier rollen die Partikel primär übereinander ab. Auch wenn die Datengrundlage keine genaue Aussage über die Form der Funktion $\mu_{\text{makro}}(\mu)$ zulässt, wird die makroskopische Reibung im Sättigungsbereich bei hohem μ durch den Rollreibungskoeffizient bestimmt [102, 207]. Es ist somit denkbar, dass auch andere Kombinationen aus μ und μ_r den gleichen makroskopischen Reibungskoeffizienten reproduzieren. Aufgrund der schwierigen experimentelle Überprüfung ob Rollen oder Gleiten bevorzugt wird, scheinen die hier gewählten Reibungskoeffizienten zulässig.

In Schertests konnte das Material im adhäsionsbestimmten Grenzfall als sehr kohäsiv klassifiziert werden [215]. Dies äußert sich auch durch einen lastabhängigen makroskopischen Reibungskoeffizient des stationären Zustands (vgl. Abb. 5.5). Übliche Modelle des kritischen Zustands [274, 245] schlagen fehl. Im Rahmen der Kalibrierungssimulationen wurde ein Modell für die kritische Zustandslinie und damit $\mu_{\text{makro}}(\sigma)$ vorgeschlagen (vgl. Gl. (5.8)). Dies orientiert sich in der Form an der Mohr-Coulomb-

Theorie, besitzt jedoch einen lastunabhängigen makroskopischen Kohäsionsterm. Gravitation macht den Bereich verschwindend kleiner Normallasten experimentell schwer zugänglich, sodass die Bestätigung eines makroskopischen Kohäsionsterms in der kritischen Zustandslinie für einige eher schwach kohäsive Pulver fraglich bleibt. In DEM-Simulationen mit lastabhängigen Adhäsionskräften beobachteten Luding und Alonso-Marroquín einen nicht-linearen Anstieg der kritischen Zustandslinie vom Ursprung bis zu einer Normalspannung von ≈ 0.3 kPa [276]. Die Modellkalibrierung und Validierung zeigte, dass hier der experimentelle Befund mit einer primär normallastunabhängigen Adhäsionskraft reproduziert werden kann (vgl. Abb. 5.11). Simulationen, in denen die Anziehungskraft zwischen Partikeln proportional zu ξ_{\max} wächst, konnten diese Charakteristik nicht reproduzieren (nicht gezeigt). Welchen mikroskopischen Ursprung haben die Adhäsionskräfte im unverbackenen Fall? Van-der-Waals-Kräfte würden mit wachsender Kontaktfläche zunehmen [280] und der konstante Anteil der Adhäsionskraft ist für leicht verformbare Materialien i.d.R. vernachlässigbar [281]. Dies widerspricht der Normallastunabhängigkeit, da Nanoindentationsversuche ein fast ausschließlich plastisches Kontaktverhalten und damit eine zunehmende Kontaktfläche zeigen [215]. Eine elektrostatische Aufladung der Partikel könnte zwar eine kontaktflächenunabhängige (langreichweitige) Adhäsionskraft bedingen, würde aber im Haufwerk auch zur Abstoßung gleichartig geladener Partikel führen. Im Mittel verringert sich die Fließfähigkeit nicht zwangsweise. Eine weitere Ursache für solches Verhalten wäre eine durch zyklische, versetzte Belastung der Kontaktstellen verursachte lastabhängige, stationäre Oberflächenrauigkeit der Partikel. Dieser Mechanismus wurde mit einem 1+1 dimensionalem *solid-on-solid-Modell* untersucht (siehe Anhang A.2). Zwei plastische Oberflächen werden zyklisch versetzt gegeneinander gepresst bis die Kontaktlänge der vorgegebenen Gleichgewichtskontaktlänge, dem zentralen Parameter des Modells, entspricht. Bei vorgegebener Fließgrenze (σ_{pl}) ist diese Gleichgewichtskontaktlänge proportional zu einer externen Kraft, d.h. durch Variation der Gleichgewichtskontaktlänge können verschiedene Normallasten überprüft werden. Es zeigt sich, dass die Oberflächenrauigkeit mit steigender Gleichgewichtskontaktlänge (externer Kraft) abnimmt. Ob die Krümmung der Partikel die Aussage dieses Modells ändert, bleibt zu prüfen. Das Fließverhalten im zementierenden Grenzfall ($t_c \rightarrow \infty$) offenbart im Gegensatz zum adhäsionsbestimmten Grenzfall eine Lastabhängigkeit der relevanten Kontaktfläche. Aufgrund der idealisierten Polydispersität und Partikelform ist zu erwarten, dass die durchschnittlich verbackene Kontaktfläche in den Simulationen unterschätzt wird. Die Kalibrierung des Geometriefaktors resultierte jedoch in $\chi \approx 2.3$. Im Vergleich zu Kugeln ($\chi = \pi$) wird die Kontaktfläche also überschätzt. Dies widerspricht dem durch SEM-Aufnahmen gewonnenen Eindruck. Wahrscheinlich ist die zementierte Kontaktfläche zwischen den Partikel nicht einfach verbunden. Die unterschiedliche Lastabhängigkeit der attraktiven Partikelwechselwirkung im zementierungsbestimmten und adhäsionsbestimmten Grenzfall kann nicht erklärt werden und bietet einen Startpunkt für weitere Untersuchungen.

Die Tatsache, dass es sowohl ohne, als auch mit Lagerungszeit eine Adhäsionskraft zwischen den Partikeln gibt, widerspricht der ursprünglichen Arbeitshypothese, kohäsive granulare Materie durch adhäsions- und zementierungsbestimmtes Verhalten zu kategorisieren. Neue Kontakte in Bruchversuchen einer zementierten Probe erfahren auch Adhäsionskräfte, sodass das Fließverhalten nicht eindeutig klassifiziert werden kann.

Außerdem sind auch im adhäsionsbestimmten Grenzfall stationäre Scherbänder zu beobachten (vgl. 5.8(b)) und kein sprunghaftes Verhalten der Scherlokalisierung. Dabei sei angemerkt, dass hier Wände mit Mitnehmern benutzt wurden und die Scherung nicht an den Wänden lokalisiert ist. Die Ergebnisse aus Abs. 5.5 legen nahe, dass Verbackung im stationären Zustand keinen Einfluss auf die Scherlokalisierung hat.

Trotz der benutzten Vereinfachungen ist das kalibrierte Modell in der Lage, das komplexe Fließverhalten eines Haufwerks nicht-kugelförmiger, μm großer KCl-Partikel zu beschreiben. Während die essentiellen Eigenschaften der realen Kontaktmechanik zwischen den Partikeln im Kontaktmodell abgebildet werden, konnten vernachlässigte Details durch Kalibrierungsparameter aufgefangen werden. Die Abbildung nicht runder Partikel auf Kugeln hat große Auswirkung auf die Simulationszeit. Die einfache Berechnung des Überlapps zwischen Kugeln, im Gegensatz zu nicht runden Partikeln, ermöglicht Simulationen mit 10^6 und mehr Partikeln in annehmbarer Zeit. In Kombination mit herunterskalierten Experimenten, wie dem Mikroschertester [282, 117], ist somit ein direkter Vergleich zwischen Experiment und Simulation möglich. Neben dem Vergleich des mechanischen Verhaltens kann durch die Integration des Mikroschertesters in einen Röntgen-Computer-Tomographen auch die Struktur des Schüttguts im Experiment untersucht werden. Ein direkter Vergleich der Struktur, wie ihn Torbahn et al. [84] für Glaspartikel durchführten, erhöht dabei die Validierungstiefe der Kontaktmodelle. Andererseits können die so validierten Simulationen wertvolle Informationen zu orts aufgelösten Größen wie Spannung, Koordinationszahl und Kontaktorientierung geben, welche im Experiment nicht oder nur schwer zugänglich sind.

KAPITEL 6

Fazit

Neben der Untersuchung des Fließverhaltens zeitverfestigender granularer Materie wurden Fragen zum quasistatischen Fließverhalten kohäsiver sowie kohäsionsloser Schüttgüter behandelt. Die gewonnenen Erkenntnisse lassen sich zwei Kategorien zuordnen: methodische Aspekte, wie die Verwendung von Lees-Edwards-Randbedingungen im quasistatischen Grenzfall und die Modellierung von Kaliumchlorid in DEM-Simulationen sowie physikalische Aspekte zum Fließverhalten kohäsiver und zeitverfestigender Materie.

Diese Arbeit bestätigt erneut, dass die Diskrete-Elemente-Methode eine adäquate Beschreibung granularer Materie darstellt. Nutzt man dazu weiche Partikel können elastische und plastische Eigenschaften des Materials im Kontaktmodell berücksichtigt werden, welche die Rheologie des Haufwerks beeinflussen (vgl. Kap. 5). Neben dem Einfluss mikroskopischer Parameter auf das makroskopische Fließverhalten (vgl. Kap. 5.3.4 - 5.3.6 sowie 4.4 - 4.6) können experimentell schwer zugängliche Fragestellungen untersucht werden. Simulationen mit reibungsfreien Partikel ohne Gravitation (vgl. Kap. 4.4) sowie die kontinuierliche Variation der Verfestigungszeit (vgl. Kap. 4.6) sind hier als Beispiele zu nennen. Dabei kann die Verwendung dimensionsloser Größen (I , η sowie $\dot{\gamma} t_c$) zur materialübergreifenden Interpretation der Ergebnisse genutzt werden. Eine wichtige Erkenntnis dieser Arbeit betrifft die Verwendung von Lees-Edwards-Randbedingungen im quasistatischen Grenzfall. Nur bei einem Seitenverhältnis $L_y/L_x < 2.5$ wird tatsächlich die gesamte Probe geschert. In diesem Regime wird zu bestimmten, periodisch auftretenden Zeitpunkten eine Rotation des gesamten Haufwerks beobachtet (vgl. Kap. 4.3.2). Dieses Phänomen ist weder Reibung noch Adhäsionskräften zuzuschreiben (vgl. Kap. 4.4 und 4.5). Zwar kann die periodische Rotation als Artefakt von Lees-Edwards-Randbedingungen klassifiziert werden, die Ursachen sind jedoch intrinsische Eigenschaften quasistatischer, planarer Scherung: induzierte Rotation (vgl. Gl. (4.18)) und langreichweitige Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen (vgl. Kap. 4.3.1). Ob es ratsam ist Lees-Edwards-Randbedingungen zur Untersuchung des quasistatischen Regimes zu verwenden, hängt von der Problemstellung ab. In jedem Fall muss bei der Interpretation der Ergebnisse der hier aufgezeigte Effekt und dessen

Auswirkung auf div. Größen (lokale Scherrate sowie Spannung bei kohäsivem Material) berücksichtigt werden.

Die Modellierung von Kaliumchlorid in DEM-Simulationen stellt einen weiteren methodischen Aspekt dieser Arbeit dar (Kap. 5). Es ist nicht trivial, dass das Fließverhalten μm großer, nicht runder Partikel mit anspruchsvoller Kontaktmechanik durch Simulationen mit Kugeln vorhergesagt werden kann. Die Verwendung von Kugeln ist vorteilhaft für die Rechenzeit und ermöglicht einen direkten Vergleich zwischen Simulationen und kleinskaligen Experimenten mit gleicher Partikelanzahl und Scherdeformation (siehe z.B. [84]). Die Validierung durch direkten Vergleich legitimiert nicht nur die Verwendung von Modellen zur Vorhersage des Materialverhaltens bei verfahrenstechnisch relevanten Fragestellungen, sondern erlaubt auch Rückschlüsse auf die Mikromechanik der Partikel. Dies wirft physikalisch interessante Fragen auf.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Fragen zum Verhalten kohäsiver granularer Materie behandelt (vgl. Kap. 4.5). Die Ergebnisse legen nahe, dass die fraktale Substruktur in gescherten kohäsiven Pulvern mit $\eta < 100$ vernachlässigbar ist. Zum Vergleich: Die Kalibrierung von Kaliumchlorid, das als sehr kohäsives Schüttgut klassifiziert wurde [215], ergab $\eta \approx 6.3$ im adhäsionsbestimmten Grenzfall. Die fraktale Dimension des kritischen Zustands im 2D-Modell ist, im Vergleich zu anderen Studien [24, 186, 19], unabhängig von der Anfangskonfiguration. Neben der Quantifizierung der fraktalen Dimension erweist sich die Dichte-Korrelationsfunktion, im Gegensatz zur Korrelationsfunktion der Geschwindigkeitsfluktuationen, als geeignete Messgröße um eine charakteristische Länge jenseits des Partikeldurchmessers zu ermitteln ($\leq 10 \langle d \rangle$). Im 2D-Modell wird auch im quasistatischen Grenzfall die Agglomeration von Partikeln zu Clustern beobachtet, d.h. eine Differenzierung zwischen adhäsionskraftbedingten Clustern und dem agglomerierten Haufwerk (Cluster nach Campbell [165]) ist möglich. Diese Cluster haben eine endliche Lebensdauer und sind keine festen, fraktalen Aggregate/Bruchstücke der Anfangskonfiguration (vgl. Kap. 4.5). Der Vergleich zu Kaliumchlorid zeigt, dass Cluster in kohäsiver granularer Materie verschiedenen Ursprungs sein können. Typische Anzeichen für die Agglomeration von Partikeln mit steigendem η (steigende Koordinationszahl bei abnehmender Packungsdichte) sind für KCl nicht messbar. Obwohl hohe Rollreibung die Agglomeration von Partikel unterdrückt [19], findet eine Kollektivbewegung der Partikel in Clustern statt (vgl. Abb. 5.8). Hier wird die Clustergröße durch die mechanische Beanspruchung definiert.

Die Untersuchung des Felds der lokalen Scherrate im quasistatischen Fluss mit biphasischen Randbedingungen stellt einen weiteren Aspekt dieser Arbeit dar. Um das Deformationsverhalten im quasistatischen Zustand unverfälscht abzubilden, wurde auf eine direkte Beeinflussung der Partikeltrajektorien verzichtet (vgl. Kap. 4.1.3). Dennoch ist das Deformationsfeld für kohäsive sowie kohäsionslose Pulver und ein Seitenverhältnis $L_y/L_x < 2.5$ im zeitlichen Mittel homogen. Fluktuationen des Geschwindigkeitsfeld offenbaren hingegen eine langreichweitige Korrelationen und temporäre scherbandähnliche Bereiche (vgl. Abb. 4.11(b) und 4.19). Es lässt sich keine charakteristische Funktion an das 1D-Feld der lokalen Scherrate anpassen (vgl. Kap. 4.3.1 sowie 4.6.2), obwohl die einfache Modellierung durch ein Mohr-Coulomb-Modell schon eine

ähnliche Korrelationsfunktion ergibt (Kap. 4.3.1). Die endliche Breite von Bereichen mit großer lokaler Scherrate sowie eine Differenzierung von plastischer und elastischer Deformation sind Punkte, in denen das Modell verbessert werden sollte. Die Breite scherbandähnlicher Bereiche im Feld der lokalen Scherrate kohäsiver Schüttgüter wurde quantifiziert und zeigt qualitativ Übereinstimmungen mit der Literatur (vgl. Kap. 4.5).

Schwerpunkt dieser Arbeit bildet die Untersuchung des Fließverhaltens zeitverfestigender granularer Materie. Die Modellierung von Kaliumchlorid zeigt, dass eine strikte Unterteilung kohäsiver Schüttgüter in adhäsions- und zementierungsbestimmtes Verhalten nicht sinnvoll ist (vgl. Kap. 5). Kaliumchlorid besitzt sowohl im unverbackenen als auch im Fall großer Lagerungszeit vor mechanischer Beanspruchung eine merkliche makroskopische Kohäsion. Die Verfestigungszeit ist dabei groß im Vergleich zur simulierten Zeit, sodass allein die Präparation der Probe über adhäsions- und zementierungsbestimmtes Verhalten entscheidet. Auch die beobachteten Scherheterogenitäten bei Kaliumchlorid bestätigen nicht die Arbeitshypothese. Im adhäsionsbestimmten Grenzfall existieren stationäre Scherbänder während der stationäre Fließzustand der untersuchten zementierten Proben nicht mehr durch Restzementierung beeinflusst wird (vgl. Kap. 5.3.5 und 5.5). Ersteres ist der moderaten Adhäsionskraft zuzuschreiben. Es ist bemerkenswert, dass durch Mitnehmer an den Wänden stationäre in Wandnähe unterdrücken (vgl. Abb. 5.8(b)). Es bleibt zu prüfen, ob stationäre Scherbänder auch für $\eta > 10$ existieren. Dazu sollten größere Systeme und Scherdeformationen sowie andere Wandrauigkeiten benutzt werden. Gleiches gilt für weitere Untersuchungen zementierter Proben. Selbst wenn durch gezielte Präparation stationäre Bruchzonen bei planarer Scherung erzeugt werden können, ist dies in Anbetracht der vielzähligen Präparationsmöglichkeiten ein eher theoretisches Szenario. Für konkrete Anwendungen zur Vorhersage von Bruchzonen in zementierten Schüttgütern oder Böden sollte stets die Vorbelastung berücksichtigt werden. Bemerkenswert bei Kaliumchlorid ist die unterschiedliche Lastabhängigkeit der Adhäsionskraft in diesen beiden Grenzfällen. Es zeigte sich, dass der experimentell gemessene makroskopische Reibungskoeffizient des stationären Fließens im adhäsionsbestimmten Grenzfall mit einer lastunabhängigen Adhäsionskraft reproduziert werden kann (vgl. Kap. 5.3.3). Der genaue mikroskopische Ursprung dieser Adhäsionskraft konnte nicht geklärt werden. Neben der mittleren plastischen Kontaktdeformation ändert sich bei steigender Normallast auch die Struktur. Ob diese Strukturänderung eklatante Defizite des Modells offenbart (wie z.B. in [283]) sollte in einem direkten Vergleich der Strukturen in Experiment und Simulation geklärt werden. Ferner muss das vorgeschlagene Modell der kritischen Zustandslinie kohäsiver Schüttgüter (vgl. Gl. (5.8)) durch weitere Untersuchungen verifiziert werden. Auf Basis dessen können Modelle wie z.B. das *cam-clay* Modell [245] für kohäsive Medien erweitert werden. Gerade der Vergleich zur kritischen Zustandslinie für Ludings Kontaktmodell [276] zeigt, dass das Verhalten im Bereich kleiner Normalspannungen stark von der expliziten Form des Adhäsionskraftmodells abhängt. Eine materialübergreifende Modellierung ist fraglich.

Des Weiteren wurde mit einem 2D-Modell systematisch der Einfluss der Verfestigungszeit t_c auf das Fließverhalten untersucht (Kap. 4.6). Für das hier gewählte Präparationsprotokoll tritt im zementierungsbestimmten Grenzfall keine Dilatanz durch restze-

mentierte Bruchstücke auf. In Abhängigkeit der Systemhöhe konnte sowohl homogenes Aufbrechen als auch die Ausweitung initialer Risse beobachtet werden. Der stationäre Zustand entspricht stets einer unverbackenen Probe, wobei die Aufbruchzeit in der Größenordnung $100/\dot{\gamma}$ liegen kann. Insofern wäre es fahrlässig den Zustand nach einer Scherdeformation von $\dot{\gamma} t \approx 2$ inkl. der Scherbandbreite als stationär zu definieren wie in [128]. Um den Einfluss der Anfangskonfiguration zu überprüfen, wäre ein direkter Vergleich mit einer dicht gepackten Anfangskonfiguration (z.B. kritischer Zustand von $\eta = 0$) sinnvoll. Die qualitative Analyse von Kaliumchlorid (vgl. Kap. 5.5) zeigt, dass auch überverfestigte Proben vollständig aufbrechen. Weder im adhäsions- (vgl. Kap. 4.5) noch im zementierungsbestimmten Grenzfall (vgl. Kap. 4.6) treten stationäre Scherbänder auf, was wahrscheinlich den Lees-Edwards-Randbedingungen zuzuschreiben ist. Dies sollte durch einen direkten Vergleich mit wandgetriebenen Simulationen weiter untersucht werden. Bekannterweise hängt die Scherbandbreite von der Wandrauigkeit ab. Während bei glatten Wänden eine Scherzone direkt an der Wand beobachtet werden kann [45, 46], können raue Wände sowohl ein homogenes Scherprofil [62] als auch eine Scherlokalisierung im Haufwerk [128] (sowie Abb. 5.8(b)) verursachen. Ein direkter Vergleich erfordert somit eine systematische Analyse des Einflusses der Wandrauigkeit auf Scherlokalisierung. Wie das Beispiel Kaliumchlorid zeigt, kann diese Wandrauigkeit dem Schüttgut auch eine charakteristische Länge aufprägen (vgl. Kap. 5.3.5 und 5.5).

Fordert man als Kriterium für quasistatische Deformation, dass $\dot{\gamma}^{-1}$ alle Zeitskalen des Schüttguts übersteigen muss, ist im zementierungsbestimmten Grenzfall keine quasistatische Scherung möglich. Die Scherrate bestimmt die Kontaktzeit der Partikel während der Scherung und somit kann nur im Fall $\dot{\gamma} t_c \ll 1$ scherratenunabhängiges Verhalten beobachtet werden. Das 2D-Modell offenbarte im Regime $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ interessantes Fließverhalten. Hier fördert ein inhomogenes Kontaktzeitprofil die Entstehung stationärer Scherbänder. Dies erlaubt die Schlussfolgerung, dass für $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ kein homogenes Fließen möglich ist. Die lokale Scherrate in Abhängigkeit der Höhe kann mit einer Gauß-Funktion modelliert werden, deren Breite mit steigender Verfestigungszeit wächst und deren Mittelpunkt eine subdiffusive Bewegung ausführt. Scheraktiver Bereich besitzen aufgrund der geringeren effektiven Kohäsion eine größer Dichte, d.h. Kontraktanz statt Dilatanz. Es bleibt zu prüfen, ob dieser Dichtegradient auch die Bewegung des Scherbandmittelpunkts verursacht (Anfangskonfigurationen unterschiedlicher Dichte). Die Existenz stabiler Scherbänder im Falle $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ sowie das Ausbleiben von Scherlokalisierung in den Grenzfällen $t_c \rightarrow 0$ und $t_c \rightarrow \infty$ konnte mit Hilfe des Prinzips minimaler Energiedissipation im Rahmen einer lokalen Rheologie begründet werden. Dieses Modell sagt sowohl die Abhängigkeit der Scherbandbreite von t_c , als auch von der Systemhöhe qualitativ richtig vorher. Die Scherbandbreite wird in der Theorie unterschätzt. Ob die diskutierten Ansätze zur Berücksichtigung der Fluktuationen diese Diskrepanz beheben, bleibt zu prüfen.

Gerade das Fließverhalten im Regime $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ und somit die Ergebnisse von Kap. 4.6 sollten nicht als rein theoretisches Szenario missachtet werden. Neben der Tatsache, dass es keinen homogenen Fluss in diesem Regime gibt, ist auch der Einfluss auf das mechanische Verhalten bemerkenswert. Bei vorgegebener Verfestigungszeit t_c kann durch Variation der Scherrate das Regime $\dot{\gamma} t_c \approx 1$ erreicht werden. Im Falle von

Kaliumchlorid entspräche das einer experimentell durchaus realisierbaren Scherrate von $\dot{\gamma} \approx 1/(15 \text{ min})$, d.h. bei einer Scherzellenhöhe von 4 cm einer Schergeschwindigkeit von $\approx 2.6 \text{ mm/min}$. Obwohl man sich im quasistatischen Regime befindet und Trägheitseffekte vernachlässigt werden können, hängt der makroskopische Reibungskoeffizient des kritischen Zustands von der Scherrate ab (vgl. Abb. 4.24). Im Gegensatz zum konstitutiven Gesetz (Gl. (2.7)) wird es mit zunehmender Scherrate (bei konstantem t_c) leichter, das Material zu deformieren.

ANHANG A

Anhang

A.1. Lineare Näherung

Eine strenge Definition quasistatischer Scherung wäre die Forderung, dass die Deformationsrate klein im Vergleich zu allen systeminternen Zeitskalen sein muss. Das System sollte genug Zeit zur Relaxation haben. Neben den bereits im Kap. 4.2 diskutierten Größen soll der folgende Abschnitt die Zeitskalen der kollektiven Bewegung (der Partikel) abschätzen. Auf Basis eines zweidimensionalen Feder-Dämpfer Kontaktnetzwerks werden durch lineare Näherung der Bewegungsgleichungen Schwingungsmoden des Partikelkollektivs untersucht. Diese lineare Näherung ist ein mächtiges Werkzeug bei der Untersuchung komplexer Systeme [284] und gibt Aufschluss über das Kollektivverhalten der Partikel. Hier soll die Analyse für das vereinfachte Kontaktmodell aus Kap. 4.1.1 durchgeführt werden und die Schwingungsspektren ähnlicher Packungen untersucht werden. In Hinblick auf die strengere Definition quasistatischer Verformung ist jedoch nur die Quantifizierung der größten Zeiten relevant.

Die Analyse von Schwingungsmoden kristalliner Festkörper ist Bestandteil der Grundvorlesung zur Festkörperphysik [285] und wird durch Periodizität und Symmetrie der Kristallstruktur in einfachen Fällen analytisch greifbar. Betrachtet man das starre Haufwerk als amorphen Festkörper, stellt sich die Frage, ob auch hier eine Analyse der Schwingungsmoden möglich ist. Neben früheren Arbeiten zu Schwingungsmoden in ungeordneten Systemen (siehe z.B. [286, 287]), wurde die Frage erneut im Rahmen der Arbeiten zum *Jamming-Übergang* [288–290, 51] aufgeworfen. Hierbei wurde die Antwort von Systemen oberhalb des Jamming-Übergangs auf kleine Störungen in linearer Näherung behandelt. Spätere Arbeiten erweiterten die Untersuchung auf Partikelsysteme mit Reibung [291–293, 213, 294, 284] und sogar gedämpfte Systeme¹ [135, 296]. Auf Grundlage dieser Arbeiten werden im Folgenden die Bewegungsgleichungen linearisiert und für unterschiedliche Systeme gelöst. Die resultierenden Schwingungsmoden offenbaren Frequenzen (ω) und Relaxationszeiten (τ_{rel}) des Systems. Auch wenn die dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen einen endlichen Wert in dem betrachteten Limes $\omega \rightarrow 0$ suggerieren, existiert durch die endliche Systemgröße immer eine kleinste Frequenz/Rate. Quasistatische Simulationen profitieren in dieser Hinsicht von einer endlichen Systemgröße, da die Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten nach unten beschränkt sind. In einer anderen Lesart wäre die nachfolgende Studie dementsprechend eine Finite-Size-Analyse, der Erkenntnisgewinn ist jedoch deutlich größer.

Unterteilt ist dieser Exkurs wie folgt: Abschnitt A.1.1 erklärt die Linearisierung der Bewegungsgleichung inklusive der Annahmen, die für die Berechnung notwendig sind. Die Präparation der untersuchten Systeme wird in Abschnitt A.1.2 erläutert. Die Abschnitte A.1.3–A.1.5 beschreiben die Ergebnisse der Studie, welche in Abschnitt A.1.6 zusammengefasst und diskutiert werden.

¹Allerdings behandeln diese Arbeiten den überdämpften Grenzfall und sind daher primär für Systeme mit verschwindender Partikelmasse wie z.B. Schaum [295] relevant.

A.1.1. Methodik

Ausgangspunkt der Untersuchung bildet das um Kohäsion erweiterte lineare Feder-Dämpfer Modell (siehe Kap. 4.1.1) mit Berücksichtigung von Tangentialkräften und Drehmomenten. Folgende Annahmen liegen diesem Abschnitt zu Grunde:

- Das Kontaktnetzwerk ist statisch.
- Die Kontakte unterliegen ausschließlich statischer Reibung.

Diese Annahmen eines festen Kontaktnetzwerk mit einer unendlich hohen Coulomb-Barriere erscheinen recht krude und wirken für ein Haufwerk nicht kohäsiver Partikel sehr unrealistisch. Dennoch sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass Kohäsion nicht nur das Kontaktnetzwerk durch Zugkräfte stabilisiert (vgl. Kap. 4.5), sondern auch die Coulomb-Barriere hebt. Analysiert wird im folgenden nur das mechanische Netzwerk, d.h. Partikel die keine Kräfte tragen (Rattler) werden für die Berechnung vernachlässigt.

Die Normalkomponente der Kraft zwischen zwei Partikeln i und j im benutzten Kontaktmodell ist gegeben durch

$$\underline{F}_n = \left(k_n \xi - \gamma_n \dot{\xi} \right) \underline{n}_{ij} \quad , \quad (\text{A.1})$$

wobei der Überlapp $\xi = (d_i + d_j)/2 - |\underline{r}_i - \underline{r}_j|$ durch die Positionen \underline{r}_i der Partikel bestimmt ist und \underline{n}_{ij} den normierten Verbindungsvektor $\underline{r}_{ij} = \underline{r}_i - \underline{r}_j$ beschreibt. Wir betrachten nun eine infinitesimale Verschiebung der Teilchen $\delta \underline{r}_i$ aus einem Referenz/Ruhezustand $\underline{r}_i^{(0)}$ und entwickeln die Normalkraft aus Gleichung (A.1) bis zur linearen Ordnung in $\delta \underline{r}_i$:

$$\underline{F}_n \approx \underline{F}_n^{(0)} + \frac{|\underline{F}_n^{(0)}|}{r_{ij}^0} \delta \underline{r}_{ij}^{(\perp)} - k_n \delta \underline{r}_{ij}^{(\parallel)} - \gamma_n \delta \dot{\underline{r}}_{ij}^{(\parallel)} \quad , \quad (\text{A.2})$$

hierbei ist $\delta \underline{r}_{ij} = \delta \underline{r}_i - \delta \underline{r}_j$ mit Komponenten parallel (\parallel) und senkrecht (\perp) zu $\underline{n}_{ij}^{(0)}$, dem Normalenvektor des Kontakts im Referenzzustand.

Obwohl die Realisierung von Tangentialkräften in DEM-Simulationen nach Luding [100] auf Federn zurückgreift, muss die gleiche Entwicklung hier nicht durchgeführt werden. Bei Verschiebung der Kontaktpartner wird die Tangentialfeder stets in die neue Tangentialebene rotiert². Anders als der in Literatur gefundene Ansatz unter Zuhilfenahme der Rayleigh'schen Dissipationsfunktion [297, 296] folgt man hier einem eher phänomenologischen Ansatz [298]. Unabhängig von der Kontaktvorbelastung sorgt statische Reibung für einen Tangentialkraftzuwachs entgegengesetzt der Verrückungsrichtung. Hierbei ist allein der Anteil senkrecht zur Kontaktnormalen entscheidend. Ordnet man der Tangentialbewegung eine Steifigkeit k_t und Viskosität γ_t zu, kann dieser Kraftzuwachs durch

²Auch die für die Rotation benutzten Federn werden in die entsprechende Richtung rotiert. In der benutzten LAMMPS Implementation wird die Projektion benutzt.

$$\delta \underline{F}_t \approx - \left(k_t + \gamma_t \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(\delta \underline{r}_{ij}^{(\perp)} + (d_i \delta \varphi_i + d_j \delta \varphi_j) / 2 \underline{\mathcal{R}} \left(\frac{3\pi}{2} \right) \underline{n}_{ij}^{(0)} \right) , \quad (\text{A.3})$$

ausgedrückt werden. Hierbei ist neben der Verschiebung auch die Rotation des Partikel i um den Winkel $\delta \varphi_i$ berücksichtigt. In der verwendeten Notation beschreiben positive $\delta \varphi_i$ Rotationen gegen den Uhrzeigersinn, $\underline{\mathcal{R}}(\beta)$ entspricht der 2D Rotationsmatrix um den Winkel β .

Die durch die Tangentialkraft verursachten Drehmomente auf die Partikel

$$\delta \underline{M}_{ij}^{(\text{gleit})} = -d_i / 2 \left(\underline{n}_{ij}^{(0)} \times \delta \underline{F}_t \right) = \frac{d_j}{d_i} \delta \underline{M}_{ji}^{(\text{gleit})} \quad (\text{A.4})$$

sind parallel, aber nicht zwangsweise gleichgroß [100], und zeigen senkrecht zur (2D)-Simulationsebene. Rollreibung wirkt in den Simulationen ausschließlich als Drehmoment auf die Partikel. Sie unterbindet die entgegengesetzte Rotation der Kontaktpartner. Auch diesem Freiheitsgrad wird eine Steifigkeit (k_r) und Viskosität (γ_r) zugeordnet. Es gilt

$$\delta \underline{M}_{ij}^{(\text{roll})} = - \left(k_r + \gamma_r \frac{\partial}{\partial t} \right) (d_i \delta \varphi_i - d_j \delta \varphi_j) / 2 \underline{\mathcal{R}} \left(\frac{3\pi}{2} \right) \underline{n}_{ij}^{(0)} , \quad (\text{A.5})$$

wobei $\delta \underline{M}_{ij}^{(\text{roll})} = -\delta \underline{M}_{ji}^{(\text{roll})}$ ist [100].

Mit den Gleichungen (A.2), (A.3), (A.4) und (A.5) sind alle Kontaktkraftzuwächse in Abhängigkeit der Verschiebung $\underline{u}_i = (\delta \underline{r}_i, \delta \varphi_i)^T$ definiert. Fasst man alle Verschiebungen in einem Vektor $\underline{U} = \{\underline{u}_i\}$ zusammen, folgt die zeitliche Entwicklung um den Referenzzustand in linearer Näherung folgendem Gleichungssystem

$$\underline{\mathcal{M}} \ddot{\underline{U}} \approx \underline{\mathcal{K}} \underline{U} + \underline{\mathcal{G}} \dot{\underline{U}} , \quad (\text{A.6})$$

wobei die Koeffizienten der Verschiebungen in der Matrix $\underline{\mathcal{K}}$ und die der Geschwindigkeiten in der Matrix $\underline{\mathcal{G}}$ zusammengefasst sind. Die Matrix $\underline{\mathcal{M}}$ ist diagonal und beinhaltet Massen und Trägheitsmomente der Partikel. Dieses System kann durch folgende Transformation [299] gelöst werden: Man definiere einen neuen Vektor $\underline{V} \equiv \dot{\underline{U}}$ und verdoppele die Dimension des Problems:

$$\begin{pmatrix} \dot{\underline{U}} \\ \dot{\underline{V}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{1} \\ -\underline{\mathcal{M}}^{-1} \underline{\mathcal{K}} & -\underline{\mathcal{M}}^{-1} \underline{\mathcal{G}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{U} \\ \underline{V} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.7})$$

Der Ansatz $(\underline{U}, \underline{V})^T = (\underline{U}_0, \underline{V}_0)^T e^{\lambda t}$ führt die Lösung von Gleichung (A.7) zurück auf das Eigenwertproblem

$$\left[\begin{pmatrix} \underline{0} & \underline{1} \\ -\underline{\mathcal{M}}^{-1} \underline{\mathcal{K}} & -\underline{\mathcal{M}}^{-1} \underline{\mathcal{G}} \end{pmatrix} - \lambda \underline{1} \right] \begin{pmatrix} \underline{U}_0 \\ \underline{V}_0 \end{pmatrix} e^{\lambda t} = 0 . \quad (\text{A.8})$$

Dieses Eigenwertproblem wurde in dem folgenden Kapitel numerisch gelöst, wobei die Dimension des Lösungsraums dem zweifachen des ursprünglichen Lösungsraums von Gleichung (A.6) entspricht. Der Realteil des Eigenwerts λ entspricht einer Relaxationsrate (τ_{rel}^{-1}), sein Imaginärteil einer Schwingungsfrequenz (ω). Zu jeder Lösung λ ist auch das komplex konjugierte $\bar{\lambda}$ eine Lösung. Im Folgenden werden nur die Lösungen mit positivem Imaginärteil betrachtet. Die mechanische Stabilität des Systems verlangt $\Re(\lambda) < 0$. Analysiert werden Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen (kurz WDV) der Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten. Die dargestellten WDV entsprechen Kerndichteschätzungen auf Grundlage jeweils einer exemplarischen Konfiguration. Hierbei wurde ein Gausscher Kern verwendet, die Grenzen jedoch „hart“ an den minimal, bzw. maximalem Wert abgeschnitten. Die Quantifizierung der minimalen Frequenzen erfolgte aus Mittlung über mindestens vier verschiedene Konfigurationen. Um das relevante Ende der Verteilung zu visualisieren, geben die vorhandenen Fehlerbalken das Intervall zwischen dem absoluten Ensembleminimum und dem gemittelten 0.01-Quantil an. Skaliert wurde die Frequenz-/Ratenachse der Wahrscheinlichkeitsdichten mit $\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$, der Oszillationsfrequenz des zwei Partikel Stoßes.

A.1.2. Präparation des Systems

Zur exemplarischen Untersuchung der Schwingungsmoden der in dieser Arbeit betrachteten 2D Systeme wird in diesem Abschnitt ein monodisperses System mit periodischen Randbedingungen betrachtet. Hierzu wird das Kontaktmodell aus Kap. 4.1.1 verwendet. Wie in Kap. 4.2 sind auch hier die natürlichen Einheiten gegeben durch den außen angelegten Druck (P), den Durchmesser (d) und die Dichte (ρ) der Partikel. Damit ist die Zeiteinheit gegeben durch $\sqrt{\rho d/P}$. Die Steifigkeit der Partikel wurde auf $k_n = 100000 P$ festgesetzt, ein Kompromiss aus schnellen Simulationszeiten und nicht zu „weichen“ Partikeln/ zu großen Überlappen. Die Tangentialsteifigkeit beträgt $k_t = \frac{k_n}{2} = k_r$. Zur Präparation wird ein Reibungskoeffizient von $\mu = 0.5$ und $\mu_r = 0.1$ festgelegt. Um Tangentialschwingungen zu vermeiden, werden sämtliche Tangentialfedern mit einer Dämpfung $\propto 2\sqrt{k_t m_{\text{eff}}}$ versehen. Neben dem essentiellen Parameter N soll auch der Einfluss des Dämpfungskoeffizienten γ_n und der Kohäsionskraft $\eta \propto F_c$ untersucht werden.

Das Präparationsprotokoll umfasst folgende Schritte:

1. Import der Anfangskonfigurationen, die mittels des Protokolls in Kap. 3 erzeugt worden sind.
2. Kompaktierung auf den Solldruck P in beiden Raumrichtungen x und y mittels der Drucksteuerung aus Kap. 4.1.2 und $\dot{\epsilon}_0 = 10^{-4}$.
3. Relaxierungsphase bis die kinetische Energie des kompaktierten Systems verschwindend klein ist.

A.1.3. Variation des Dämpfungskoeffizienten(γ_n)

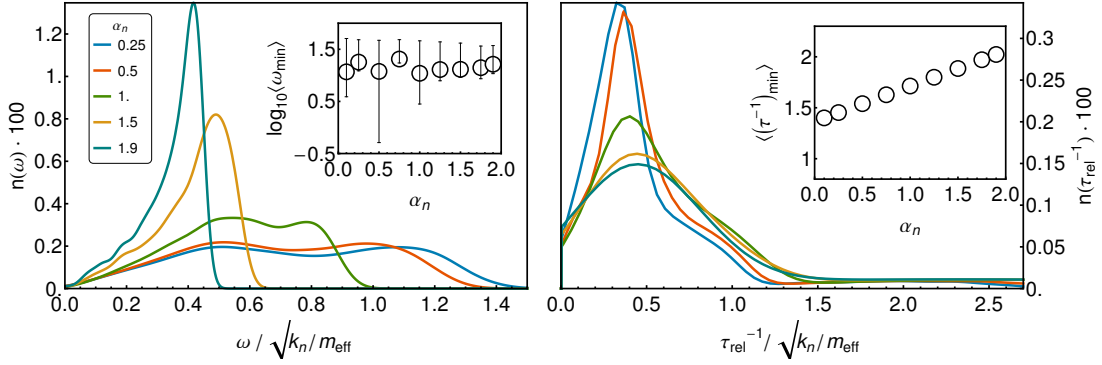


Abbildung A.1.: WDV der Schwingungsfrequenzen (links) und Relaxationsraten (rechts) für Partikelsysteme ($N = 1000$, $\eta = 1$) unter Variation des Dämpfungskoeffizienten (α_n). Die Insets zeigen das Ensemblemittel der minimal vorkommenden Frequenz, bzw. Relaxationsrate.

Die Dämpfung der Normalkomponente der Kollisionsbewegung zweier Partikel γ_n ist seit Untersuchung des *detachment effect* [173] ein Punkt des Anstoßes bei DEM Simulationen. In einem getriebenen Haufwerk elastischer Partikel steigt die Energiedissipationsrate entgegen der Intuition nicht mit γ_n . Grund hierfür sind lange Kontaktzeiten, die eine schnelle Sequenz von Stößen im Partikelkollektiv verhindern. Das hier betrachtete Kontaktnetzwerk ist per Definition starr und Energiedissipation durch multiple Kollisionen unterbunden. Um den Einfluss der „Normaldämpfung“ abzuschätzen, wird $\gamma_n = \alpha_n \sqrt{k_n m_{\text{eff}}}$ gesetzt und der dimensionslose Dämpfungskoeffizient α_n zwischen Null und Zwei variiert, also das Intervall zwischen keiner und kritischer Dämpfung des Zweipartikelstoßes untersucht.

Die WDVen der Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten sind in Abb. A.1 dargestellt. Die für kleine Dämpfungen fast bimodale WDV der Schwingungsfrequenzen (linker Graph) konzentriert sich mit zunehmender Dämpfung auf nur ein Maximum. Der Median nimmt linear mit α_n ab (nicht abgebildet). Der rechte Graph zeigt zur übersichtlichen Darstellung nur den Anteil der Relaxationsraten-WDV kleiner $2.7 \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$. Die relative Abweichung vom Median zum Modalwert liegt jedoch immer unter 50 %, i.d.R. 10 %. Hier ist für alle α_n nur ein deutliches Maximum vorhanden. Der Modalwert der Relaxationsraten nimmt mit steigender Dämpfung leicht zu. Obwohl der größte Anteil ³ der Frequenzen und Relaxationsraten die gleiche Größenordnung der mikroskopischen Zeitskala aufweist, verhindert das komplexe Kontaktnetzwerk eine einfache Modellierung, respektive Reskalierung der WDV. Bemerkenswert ist die Existenz von Schwingungsmoden mit Frequenzen $\omega > \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$ für kleine α_n , welche jedoch in einem System aus gekoppelten harmonischen Oszillatoren zu erwarten sind [285, 300]. Der Grenzfall kleiner Frequenzen, d.h. das untere Ende der Zustandsdichte, ist weitgehend unabhängig von der Dämpfungsfrequenz, wie der Inset des WDV-Graphen in

³90 % aller Frequenzen liegen zwischen $0.1 \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$ und $1.3 \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$

Abb. A.1 veranschaulicht. Im Gegensatz dazu nehmen die minimalen Relaxationsraten linear mit α_n zu (Inset linker Graph).

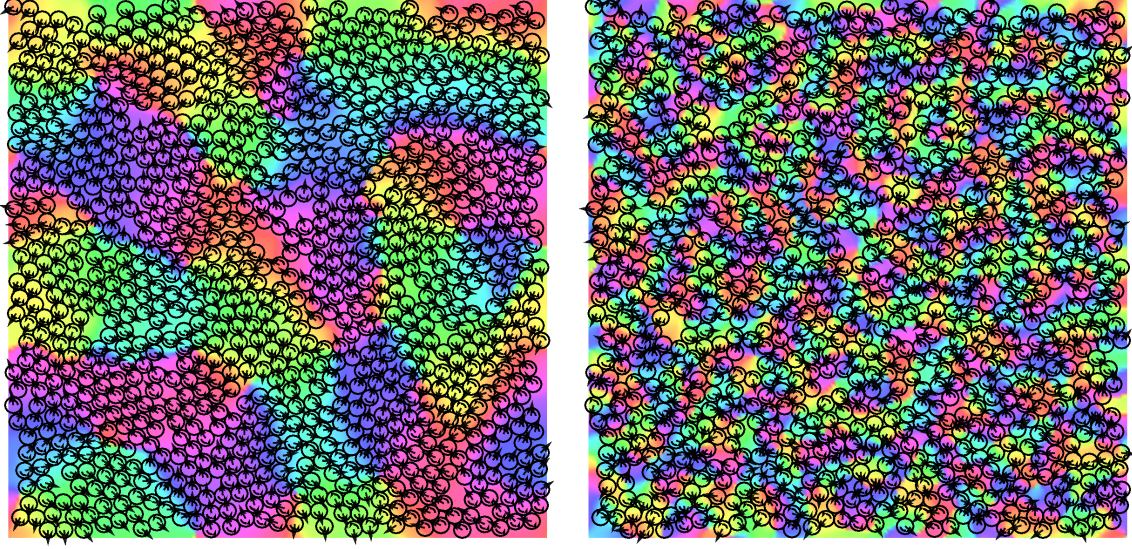


Abbildung A.2.: Exemplarische Darstellung zweier Schwingungsmoden: $\omega/\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}} \approx 0.18$, $\tau_{\text{rel}}^{-1}/\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}} \approx 0.03$ links und $\omega/\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}} \approx 0.97$, $\tau_{\text{rel}}^{-1}/\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}} \approx 0.27$ rechts. Die fetten Pfeile geben die Richtung der Translationauslenkung an, die kleinen Pfeile die Rotationsrichtung. Der Hintergrund entspricht dem Translationsfeld (coarse graining - Länge = $d/2$), die Farben geben dementsprechend die Richtung an.

Den Unterschied der Grenzfälle großer und kleiner Dämpfung verdeutlicht eine genauere Betrachtung der Schwingungsmoden, respektive Eigenvektoren \underline{U}_0 der Gleichung (A.8). Zwei Beispiele für Systeme schwacher Dämpfung ($\alpha_n = 0.25$) sind in Abb. A.2 dargestellt. Die Pfeile geben hierbei jedoch nur die Richtung von $\delta \underline{r}_i$ an, d.h. $\delta \hat{\underline{r}}_i = \delta \underline{r}_i / |\delta \underline{r}_i|$. Die Rotationsrichtung $\text{Sign}(\delta \varphi_i)$ wird durch kleine geschwungene Pfeile dargestellt. Unterlegt wurde die Konfiguration mit dem entsprechenden Feld der Translationsbewegungsrichtung, d.h. mit einer coarse graining Länge von $d/2$ wurde die Menge der Vektoren $\delta \hat{\underline{r}}_i$ zu einem kontinuierlichen Feld $\delta \hat{\underline{r}}(\underline{r})$ erweitert. Ähnlich einer eindimensionalen Kette aus ungedämpften harm. Oszillatoren existieren Moden kleiner Frequenzen, bei welchen große Bereiche kollektiv schwingen, während Moden großer Frequenz kein solch kollektives Verhalten aufweisen. Unter Annahme von Isotropie kann dieser Effekt mit Hilfe der Korrelationsfunktion

$$C_{\delta \hat{\underline{r}} \delta \hat{\underline{r}}}(\Delta r) = \frac{\mathbb{E} [\delta \hat{\underline{r}}(\underline{r}) \delta \hat{\underline{r}}(\underline{r} + \Delta \underline{r})]}{\sqrt{\mathbb{E} [\delta \hat{\underline{r}}^2(\underline{r})] \mathbb{E} [\delta \hat{\underline{r}}^2(\underline{r} + \Delta \underline{r})]}} \quad (\text{A.9})$$

quantifiziert werden, wobei $\Delta r = |\Delta \underline{r}|$ und $\mathbb{E}[\dots] = 1/\Omega \int_{\Omega} \dots dV$ dem Erwartungswert einer Funktion im Volumen Ω entspricht.

Die Korrelationsfunktionen der beiden Schwingungsmoden aus Abb. A.2 sind im linken Graphen von Abb. A.3 dargestellt. Mit Definition der Korrelationslänge als kleinsten

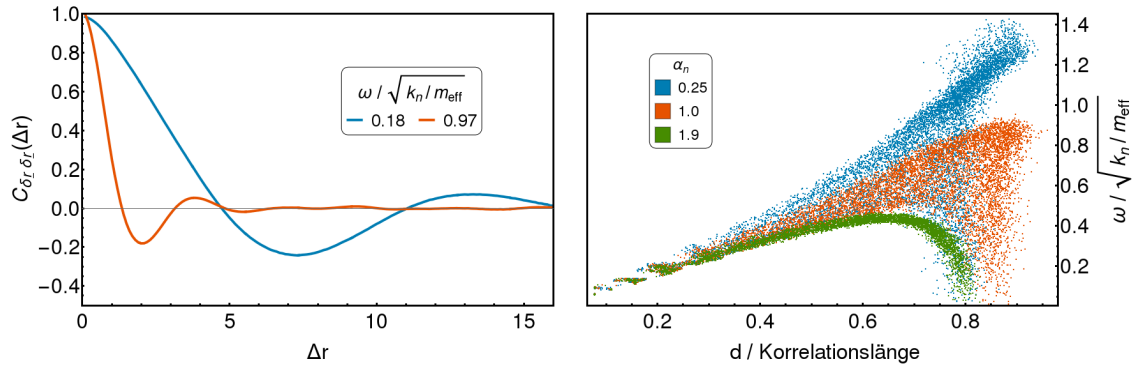


Abbildung A.3.: Links: Auf Grundlage der Translationsfelder berechnete Korrelationsfunktion für zwei verschiedene Schwingungsmoden (siehe Abb. A.2). Rechts: Auftragung der Schwingungsfrequenz über der inversen Korrelationslänge.

Abstand Δr , bei welchem $C_{\delta\hat{r}\delta\hat{r}} = 0$ kann nun jeder Schwingungsmode eine Länge zugeordnet werden. Setzt man diese Länge in grober Näherung proportional zur Wellenlänge, kann eine Quasi-Dispersionsrelation gemessen werden, dargestellt im rechten Graphen der Abb. A.3 für drei α_n . Auffällig ist eine Art Quantelung (Stufen) bei kleinen Frequenzen und großen Korrelationslängen. Dieser Effekt ist der endlichen Systemgröße zuzuschreiben und tritt auf, wenn die „Wellenlänge“ die Größenordnung der Systemlänge erreicht. Des Weiteren bedingt die Definition der Korrelationslänge unter Annahme von Isotropie eine Entartung, die im Graphen anhand der Punktwolke zu erahnen ist. Mit steigender Dämpfung zieht sich der Bereich möglicher Zustände zusammen auf eine Kurve mit negativer Krümmung ($\alpha_n = 1.9$). Die Frequenz von „kurzwelligen“ Moden wird erniedrigt, Korrelationslängen kleiner $1.25 d$ unterdrückt. Diesen Zusammenhang unterstützt der linke Graph in Abb. A.4, der die Frequenz-Raten Paare der Schwingungsmoden darstellt. Hohe Relaxationsraten erniedrigen die Frequenz der Schwingungsmode analog zum gedämpften harmonischen Oszillator. Der Bereich an Zuständen wird durch steigendes α_n quasi auf eine gekrümmte Kurve gefaltet. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass selbst im Fall $\alpha_n = 0$ Dämpfung über die Tangentialkräfte aktiv ist. Der rechte Graph komplettiert die Abb. A.3 und A.4, indem hier der Zusammenhang zwischen Korrelationslänge und Relaxationsrate aufgetragen ist. „Langwellige“ Moden haben erwartungsgemäß die kleinste Relaxationsrate.

A.1.4. Variation der Kohäsionszahl (η)

Während bei quasistatischer Prozessführung die Dämpfung γ_n keinen Einfluss auf die resultierende Packung bzgl. Dichte und Koordinationszahl haben sollte, hängen diese Größen von der Adhäsionskraft ab. Volumenanteil und mechanische Koordinationszahl sind für die betrachteten Systeme ($N = 1000$, $\alpha_n = 1.0$) in Abb. A.5 aufgetragen. Als Referenzwert markiert die gestrichelte Linie den kohäsionslosen Fall. Während der Volumenanteil ab $\eta > 1$ deutlich sinkt, weist die Koordinationszahl bei $\eta = 1$ ein Maximum

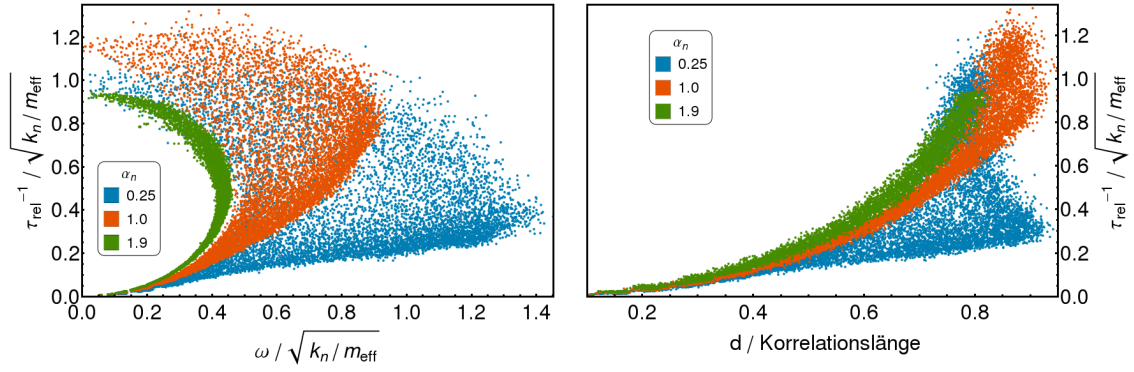


Abbildung A.4.: Links: Punktwolken der Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten für verschiedene Dämpfungskoeffizienten. Rechts: Auftragung der Relaxationsraten über der inversen Korrelationslänge.

auf. Dies steht zunächst im Gegensatz zu der in Kap. 4.5 beobachteten Abhängigkeit der mechanischen Koordinationszahl von der Kohäsionszahl (die steigt). Der Unterschied liegt in der mechanischen Belastung. Hier werden nur kompaktierte Systeme untersucht in denen die Substruktur der Anfangskonfigurationen (kettenähnliche Strukturen) bei großem η die Struktur beeinflusst. Die Struktur des stationären Fließens (Kap. 4.5) ist hingegen unabhängig von der Anfangskonfiguration.

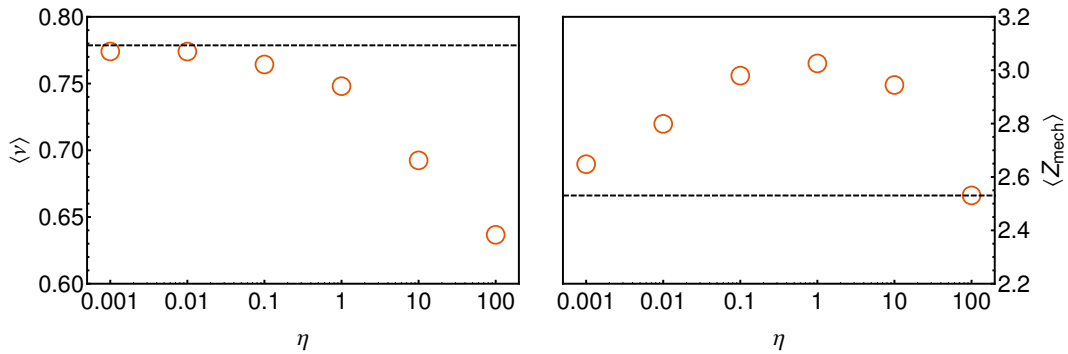


Abbildung A.5.: Volumenanteil (ν) und mechanische Koordinationszahl (Z_{mech}) der präparierten Systeme mit unterschiedlichen Kohäsionszahlen (η). Die gestrichelte Linie entspricht dem kohäsionslosen Fall.

In Abb. A.6 sind die WDVen der Frequenzen und Relaxationsraten für verschiedene Kohäsionszahlen η dargestellt. Die bimodale Verteilung der Schwingungsfrequenzen für den Fall $\alpha_n = 1$ ist auch hier für alle η wiederzufinden. Ein hervorstechendes Merkmal ist der zunehmende Anteil der Moden mit kleiner Frequenz bei wachsender Kohäsionskraft. Dies ist auch im Inset am 0.01-Quantil (dargestellt als oberes Ende des Fehlerbalken) zu erkennen. Man könnte diesen Zuwachs von Schwingungsmoden kleiner Frequenzen für $\eta \geq 100$ als Signatur des sinkenden Volumenanteils deuten: Für dicht gepackte Systeme

mit rein repulsiver Wechselwirkung bei $T=0$ wächst der Anteil überschüssiger Schwingungsmoden kleiner Frequenz bei Näherung an den Jamming-Übergang [51], was durch ein rein geometrisches Argument begründet werden kann [288]. Zusätzlich finden Wyart et al. [290], dass in solchen Systemen die untere Grenze der Zustandsdichte linear mit der *excess coordination number*⁴ wächst. Obwohl einige experimentelle Arbeiten den Jamming-Übergang feiner Pulver behandeln [125], erfordert die genauere Untersuchung dieses Zusammenhangs eine Diskussion des Jamming-Übergangs reibungsbehafteter, kohäsiver Systeme und geht weit über diese Analyse hinaus. Die kleinste hier gemessene Frequenz sinkt mit der Kohäsionszahl, auch wenn die Abhängigkeit nur schwach ist (siehe Inset des rechten Graphen in Abb. A.6).

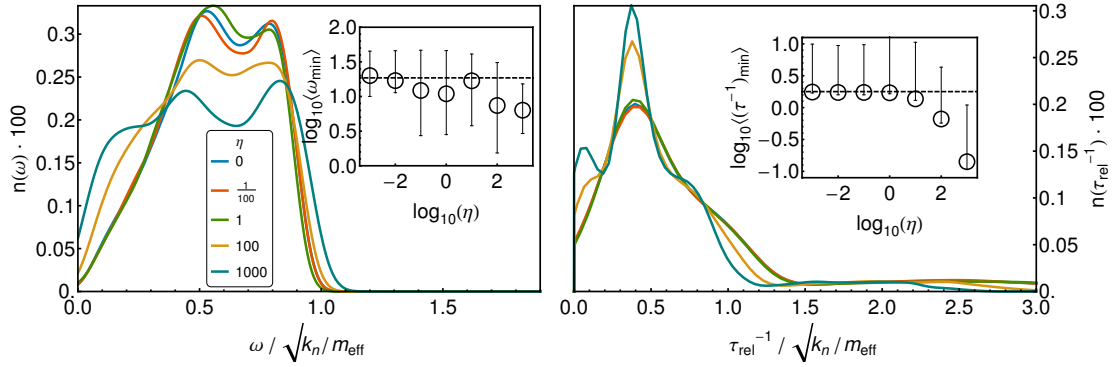


Abbildung A.6.: WDV der Schwingungsfrequenzen (links) und Relaxationsrate (rechts) für Partikelsysteme ($N = 1000$, $\alpha_n = 1.0$) unter Variation der Kohäsionskraft η . Die Insets zeigen das Ensemblemittel der kleinsten auftretenden Frequenzen, bzw. Relaxationsraten.

Die Relaxationsraten zeigen ein ähnliches Verhalten (rechter Graph in Abb. A.6): Mit steigender Kohäsionszahl wächst der Anteil kleiner Relaxationsraten. Neben dem steigenden Anteil an Raten um den Modalwert ($\approx 0.4\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$) für $\eta > 1$ entsteht ein Nebenmaximum bei $\tau_{\text{rel}}^{-1} \approx 0.05\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$. Auch dieses Verhalten kann als eine Signatur des sinkenden Volumenanteils gedeutet werden: So erweiterte [135] die Argumente von [288] für überdämpfte Systeme und zeigte, dass die Relaxationsraten-WDV eine Divergenz nahe des unjamming ausbildet. Des Weiteren wurde gezeigt, dass die Abschneidefrequenz in diesem Fall quadratisch mit der *excess coordination number* wächst. Demnach könnte ein Überschuss an kleinen Relaxationsraten als Indiz für die Nähe des Systems zum unjamming gedeutet werden. Auch hier muss natürlich betont werden, dass ein direkter Vergleich über den Rahmen dieser Untersuchung hinausgeht⁵. Der Inset des rechten Graphen von Abb. A.6 verdeutlicht die starke Korrelation zum Volumenanteil, der leichte Anstieg des 0.01-Quantil für $\eta = 1$ (oberes Ende des Fehlerbalken) lässt jedoch auch eine Abhängigkeit der Koordinationszahl erahnen.

⁴Der Differenz der Koordinationszahl zur isostatischen Koordinationszahl [301, 302, 287]

⁵So zeigt sich z.B., dass im überdämpften Grenzfall die Relaxationsraten der hier untersuchten Systeme im wesentlichen durch die mikroskopischen Zeitskalen k_t/γ_t und k_n/γ_n bestimmt, die Systeme also sehr dicht gepackt sind.

A.1.5. Variation der Systemgröße (N)

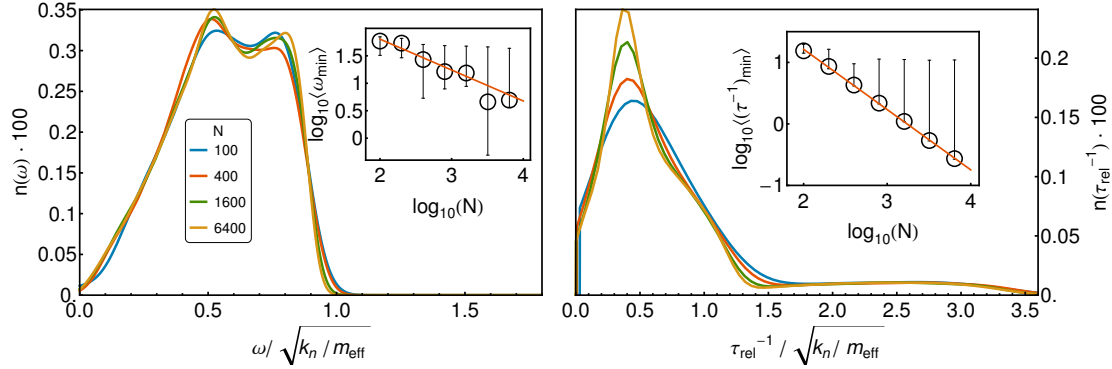


Abbildung A.7.: WDV der Schwingungsfrequenzen (links) und Relaxationsraten (rechts) für unterschiedliche Systemgrößen/ unterschiedliche Partikelzahl ($\eta = 1$, $\alpha = 1$). Die Insets zeigen das Ensemblemittel der minimal gemessenen Frequenz, bzw. Relaxationsrate.

Wie aus der Festkörperphysik bekannt, sinkt die kleinste Frequenz der Zustandsdichte mit der Systemgröße [285]. Auch wenn die hier betrachteten Systeme ungeordnet sind, ist es plausibel, dass die Schwingungsmoden mit der geringsten Energie ebenen Wellen entsprechen und ω proportional zum Wellenvektor, bzw. antiproportional zur Wellenlänge ist [290]. Die Anzahl der Partikel und damit die Systemgröße ist in dieser Hinsicht der wichtigste Parameter dieser Untersuchung. Wie in Abb. A.7 zu erkennen, variiert die Form der Zustandsdichte mit steigender Systemgröße nur gering. Während das 0.01-Quantil keine merkliche N -Abhängigkeit aufweist, sinkt die kleinste Frequenz jedoch erwartungsgemäß mit steigender Partikelzahl (siehe Inset des rechten Graphen). Ein Fit ergibt näherungsweise den Zusammenhang $\omega_{\min} \propto N^{-0.56(8)}$ (als Linie dargestellt). Mit $L \propto \sqrt{N}$ bestätigt sich die Vermutung der ebenen Welle $\omega \propto L^{-1}$.

Die Verteilung der Relaxationsraten verändert sich mit zunehmender Systemgröße wie folgt: Der Anteil an Raten um den Modalwert $\approx 0.4\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$ wächst, begleitet von einer Ausdehnung des Maximums. Um $\tau_{\text{rel}}^{-1} = \sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$ deutet sich eine weitere η unabhängige Relaxationsratendichte an. Während auch hier das 0.01-Quantil keine merkliche Abhängigkeit von N zeigt, sinkt die kleinste Relaxationsrate mit steigender Partikelzahl. Es gilt näherungsweise $(\tau_{\text{rel}}^{-1})_{\min} \propto N^{-1}$ (⁶) und damit $(\tau_{\text{rel}}^{-1})_{\min} \propto L^{-2}$. Dieses Ergebnis erscheint in Bezug auf die im letzten Paragraphen genannten, ebenen Wellen plausibel: Die Relaxationsrate langwelliger akustischer Moden in einer 1D Kette aus gedämpften harmonischen Oszillatoren mit periodischen Randbedingungen steigt ebenfalls quadratisch mit dem Wellenvektor ⁷.

⁶Der im Graphen dargestellte Fit ergibt einen Exponenten 0.979(9)

⁷Eine Diskussion dazu findet sich in [135], in welchem eine quadratische Dispersionsrelation für Relaxationsraten in überdämpften Systemen abgeleitet wird.

A.1.6. Diskussion

Ein für diese Arbeit wichtiges Resultat stellt die untere Schranke für Schwingungsfrequenzen und Relaxationsraten dar. Für den verwendeten Parameterbereich sollte somit eine quasistatische Deformation bei Deformationsraten $\dot{\gamma} < 0.1 \sqrt{P/(\rho d)}$ erreicht sein. Diese untere Schranke ist, wie bereits in der Einleitung erwähnt, der endlichen Systemgröße geschuldet und kann nun mit dem Fit aus Abb. A.7 für größere Systeme berechnet werden. Die Erwartung, dass die Schwingungsmoden mit der kleinsten Frequenz und Relaxationsrate planare Wellen sind, wurde bestätigt.

Dennoch ist diese Schranke nur bedingt anwendbar. Die Grundlage dieser Analyse bildet ein statisches Kontaktnetzwerk. Die dargestellten Zustandsdichten können als eine Art Fingerabdruck des jeweiligen Kontaktnetzwerkes gedeutet werden und verändern sich wenn Kontakte abreißen oder sich neu bilden. Neueste Studien zeigen jedoch, dass die Ergebnisse der linearen Antworttheorie auch bei veränderlichem Kontaktnetzwerk gültig bleiben [303]. Die Voraussetzungen dafür sind große Systeme (N) und ein hinreichender Abstand zum Jamming-Übergang (großes P). Besonderen Stellenwert hat der letzte Punkt, da Divergenzen der Zeitskalen nahe des unjamming eine quasistatische Deformation unmöglich machen [290, 135]. Da in dieser Arbeit der Einfluss von Scherung auf dicht gepackte Systeme untersucht wird, ist dieser Punkt höchstens bei der Präparation und der anfänglichen Kompression relevant. Auch wenn ein Jamming-Übergang für reibungsbehaftete kohäsive Systeme hier nicht diskutiert werden soll und der Vergleich für geringe Packungsdichten rein hypothetisch bleibt (vgl. Abschnitt A.1.4), konnten gewisse Analogien durch Veränderung der Packungsdichte festgestellt werden.

Eine weitere Vereinfachung stellt die Vernachlässigung von Gleitreibung dar. Die Theorie setzt unendlich große Reibungskoeffizienten voraus. Die endlichen Reibungskoeffizienten in der Simulation führen zu mobilisierten Kontakten, d.h. Kontakten an der Coulombgrenze. Für manche Systeme sind über 50 % aller Kontakte mobilisiert (zählt man Roll- und Gleitreibung zusammen), was in dieser Untersuchung nicht berücksichtigt wird.

Die Variation der Dämpfungskoeffizienten α_n offenbart eine lineare Abhängigkeit der kleinsten Relaxationsrate - ein Verhalten, das vom gedämpften harmonischen Oszillator bekannt ist. Auch wenn die Ergebnisse in dieser Hinsicht nicht überraschend sind, ist dieser Teil der Untersuchung relevant für DEM Simulationen kohäsiver Materie. Wie bereits in Abschnitt A.1.3 erwähnt darf man nicht dem Trugschluss unterliegen, dass ein höherer Dämpfungskoeffizient zu einer schnelleren und in diesem Sinn besseren Energiedissipation führt. Die längere Kontaktdauer kann bei nicht-kohäsiver Materie zu anomaler Energiedissipation führen [173]. Eine schnelle Sequenz von Kollisionen durch eine kleine Kollisionsdauer ist in diesem Sinne einer hohen Dämpfung vorzuziehen. Ob dieselbe Schlussfolgerung auch für kohäsive Materie gilt, ist unklar. Im Allgemeinen bricht hier der Kontakt nicht bei $\xi \leq 0$ (oder wahlweise $F_n \leq 0$ [92, 304]) und selbst Schwingungen um $\xi = 0$ sind möglich. Die Ergebnisse des Abschnitts A.1.3 zeigen eindeutig, dass steigendes α_n die Relaxationsraten vergrößert, d.h. eine schnellere

Energiedissipation ermöglicht. Betrachtet man das Kontaktnetzwerk kohäsiver Partikel in erster Näherung als starr, wäre dementsprechend ein hoher Dämpfungskoeffizient der schnellen Energiedissipation zuträglich. Auch wenn diese Untersuchung ein großes α_n nahelegen, kann die Frage optimaler Dämpfung hier nicht abschließend beantwortet werden und ein Mittelweg $1 \leq \alpha \leq 2$ scheint ratsam. Diese Wahl behebt auch gleichzeitig eine weitere Schwierigkeit, welche diese Untersuchung aufgezeigt hat: Für kleine Dämpfungen $\alpha_n < 1$ existieren Schwingungsmoden mit einer Frequenz größer $\sqrt{k_n/m_{\text{eff}}}$. Die Kollisionsdauer der Partikelkollision ist demnach nicht die kleinste Zeitskala des Systems.

A.2. Modell zur plastischen Deformation von Oberflächen

Die realistische Modellierung feiner Pulver in DEM Simulationen erfordert komplexe Kontaktmodelle. Partikelform, Steifigkeit und Reibungskoeffizienten definieren bei viskoelastischem Kontaktverhalten einen unhandlich großen Parameterraum. Bei einer Partikelgröße zwischen 10 – 100 μm und verfahrenstechnisch relevanten Druckbelastungen im kPa-Bereich ist auch die Plastizität der Partikel zu beachten, die in vielen Kontaktmodellen Eingang findet [100, 99, 96]. Üblicherweise wird die lokale plastische Deformation der Partikel in DEM-Simulationen nach Auflösung des Kontakts verworfen, was durch Partikelrotation und Größe der Kontaktfläche im Vergleich zur Partikeloberfläche begründet wird. Diese Näherung vernachlässigt, dass sich die Oberfläche der Partikel durch häufige Kontaktneubildung während der Scherung nachhaltig verändert. Oberflächenrauigkeit beeinflusst u.a. die Adhäsionskraft zwischen Partikeln [305, 306] und sollte somit bei Modellierung des Kontaktverhaltens berücksichtigt werden. Die in Kap. 5 modellierten Kaliumchloridpartikel weisen plastisches Kontaktverhalten auf [215]. Die Abplattung der Kontaktfläche verstärkt die effektiv wirkende van-der-Waals-Kraft zwischen den Partikeln [218], sodass die makroskopische Kohäsion des Schüttguts mit zunehmender Druckbelastung steigen sollte [279]. Die Kalibrierung des Kontaktmodells zeigt jedoch, dass der durch die Abplattung verursachte Beitrag keinen wesentlichen Anteil zur Adhäsionskraft liefert [215]. Ein möglicher Erklärungsansatz ist die Bildung einer lastabhängigen Oberflächenrauigkeit durch zyklische, plastische Verformung der Partikel. In einem einfachen 1+1 dimensional Modell soll diese Frage in folgendem Abschnitt diskutiert werden.

A.2.1. Modell

Grundlage des Modells bilden zwei eindimensionale Oberflächen der Breite L , die sich gegenüberliegen und zyklisch gegeneinander gedrückt werden. Beide Oberflächen sind auf Basis eines Quadratgitters diskretisiert, dessen Gitterkonstante im Folgenden als natürliche Längeneinheit benutzt wird. Jeder horizontalen Gitterposition x sind die Höhen der beiden Oberflächen $h_1(x)$ und $h_2(x)$ zugeordnet (vertikale Position), es können keine Überhänge entstehen. Das Modell gehört somit zur Klasse der *solid-on-solid-Modelle* [307]. In horizontaler Richtung (x) werden periodische Randbedingungen verwendet. In vertikaler Richtung sind beide Flächen anfänglich voneinander getrennt, d.h. $\Delta h(x) = h_2(x) - h_1(x) > 1 \quad \forall \quad x$. Der Abstand beider Oberflächen wird nun schrittweise um eine Gitterkonstante reduziert bis die Kontaktlänge der Gleichgewichtskontaktlänge L_{eq} (im Folgenden kurz Gleichgewichtslänge) entspricht, dem zentralen Parameter dieses Modells. Die Kontaktlänge wird dabei definiert als Summe aller Berührungspunkte L_1 und Überlappe L_0 , welche eine Höhendifferenz $\Delta h(x) = 1$, bzw. $\Delta h(x) = 0$ aufweisen (siehe dazu auch Abb. A.8). Die während der Deformation entstehenden Überlappe L_0 werden sukzessiv nach folgendem Schema abgebaut. In horizontaler Richtung zusammenhängende Kontaktpunkte (Gitterplätze x mit

$\Delta h(x) \leq 1$) werden identifiziert und zu Gruppen zusammengefasst, sog. Clustern mit Masse $M^{(i)} = L_1^{(i)} + L_0^{(i)}$. Ausgehend vom Cluster mit der kleinsten Masse und in Reihenfolge aufsteigender Masse werden nun die Überlapp abgebaut, d.h. $\Delta h = 0$ in $\Delta h = 1$ umgewandelt. Dabei wird beim Überlappabbau stets vom Clusterrand begonnen, d.h. mit dem Überlapp mit kleinster Distanz zum rechten oder linken (Entscheidung zufällig) Clusterrand. Die Höhendifferenz der entsprechenden Gitterposition am Rand des Clusters wird nun verringert, indem h_1 vergrößert oder h_2 verkleinert wird (Entscheidung zufällig). Die Gesamtmasse bleibt erhalten. Beim Abbau der Überlapp wird berücksichtigt, dass neue Kontaktpunkte am Clusterrand entstehen können, die evtl. eine Lücke zu einem anderen Cluster schließen. In diesen Fällen wird die Liste der Cluster aktualisiert und erneut der Cluster mit kleinster Masse bestimmt. Ist die Kontaktlänge nach Abbau aller Überlapp kleiner als L_{eq} , wird der Abstand der Oberflächen weiter um eine Gitterkonstante reduziert und erneut alle Überlapp abgebaut. Dieser Prozess wird iteriert bis die Kontaktlänge der Gleichgewichtslänge L_{eq} entspricht. Dann endet ein Deformationszyklus, selbst wenn noch Überlapp vorhanden sind, die als elastische Deformation interpretiert werden. Anschließend werden die beiden Oberflächen vertikal getrennt und die obere horizontal gegenüber der unteren für die nächste Deformation verschoben. Ein Nassi-Shneidermann Diagramm des Algorithmus ist in Abbildung A.9 dargestellt.

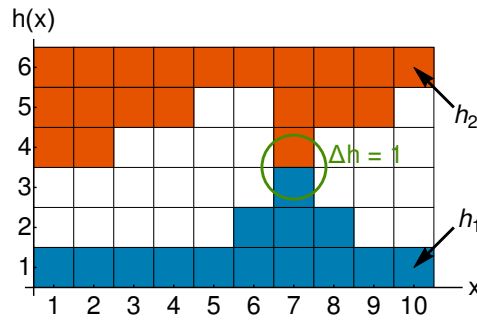


Abbildung A.8.: Skizze zum Modell mit den Oberflächen $h_1(x)$ (blau) und $h_2(x)$ (rot) die sich an der Gitterposition $x = 7$ berühren, d.h. $\Delta h(7) = 1$.

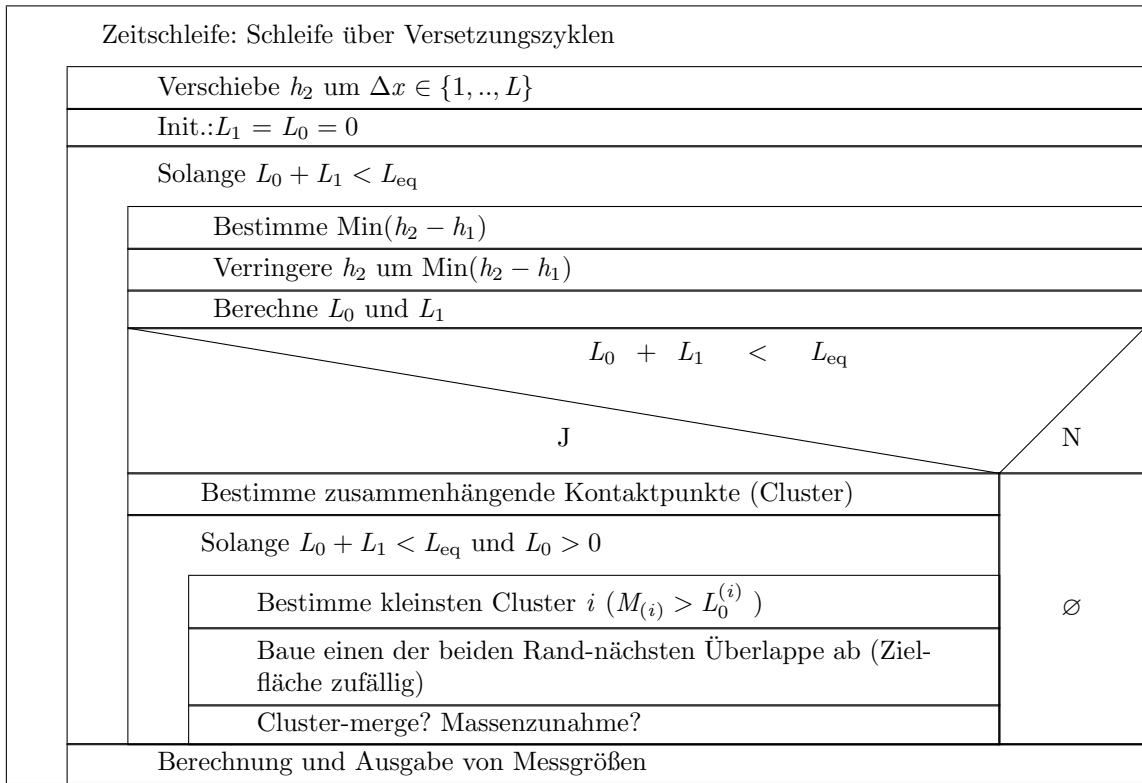


Abbildung A.9.: Darstellung des Algorithmus im Nassi-Shneidermann-Diagramm, dabei bezeichnet h_1 die untere, h_2 die obere Fläche.

A.2.2. Ergebnisse

Die folgenden Ergebnisse entstammen Simulationen mit einer Systembreite $L = 2^{12} = 4096$ unter Variation von $L_{eq} = 2^n$ mit $n \in [4, \dots, 11]$. Dabei werden 28 verschiedene Anfangskonfigurationen berücksichtigt. Abweichende Systemgrößen zur Finite-Size-Analyse werden an den entsprechenden Stellen gekennzeichnet. Initialisiert werden beide Oberflächen mit einer *random-walk* Prozedur, wobei der Höhenunterschied zwischen benachbarten Gitterplätzen $|h_i(x) - h_i(x \pm 1)| = 1$ entspricht. Dies gilt auch für die Gitterplätze am Systemrand. Es werden ausschließlich Oberflächen betrachtet, bei welchen der Random-walk nach L Schritten zur Ausgangshöhe zurückkehrt ($|h_i(1) - h_i(L)| = 1$). Die so erzeugten Oberflächen sind selbst-affin, was z.B. mit Hilfe der Fouriertransformierten der Höhen-Höhen Korrelationsfunktion gezeigt werden kann [308]. Diese gehorcht einem Potenzgesetz, dessen Exponent durch den sog. *Hurst-Exponent* bestimmt wird, eng verknüpft mit der fraktalen Dimension [309]. Der hier ermittelte Exponent für beide Oberflächen (sowie deren Differenz) hat den Wert -2 (nicht dargestellt) in guter Übereinstimmung mit der Literatur [307].

Wir überprüfen zunächst die zeitliche Entwicklung der Oberflächenrauigkeit, definiert als *Root-Mean-Square-Rauigkeit*

$$\text{RMS} = \left\langle \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{x=1}^L (h_i(x) - \langle h_i \rangle)^2} \right\rangle_{h_i}, \quad (\text{A.10})$$

welche über alle simulierten Oberflächen h_i gemittelt wird (Abb. A.10). Ausgehend von der Rauigkeit der Anfangskonfiguration nimmt RMS mit zunehmenden Deformationszyklen ab und erreicht einen von der Gleichgewichtslänge abhängigen stationären Zustand. Sowohl die Rauigkeit im stationären Zustand, als auch die Anzahl benötigter Deformationszyklen bis zum stationären Zustand sinkt mit zunehmendem L_{eq} . Für kleine Gleichgewichtslängen scheint RMS im Vergleich zur Anfangskonfiguration fast unverändert.

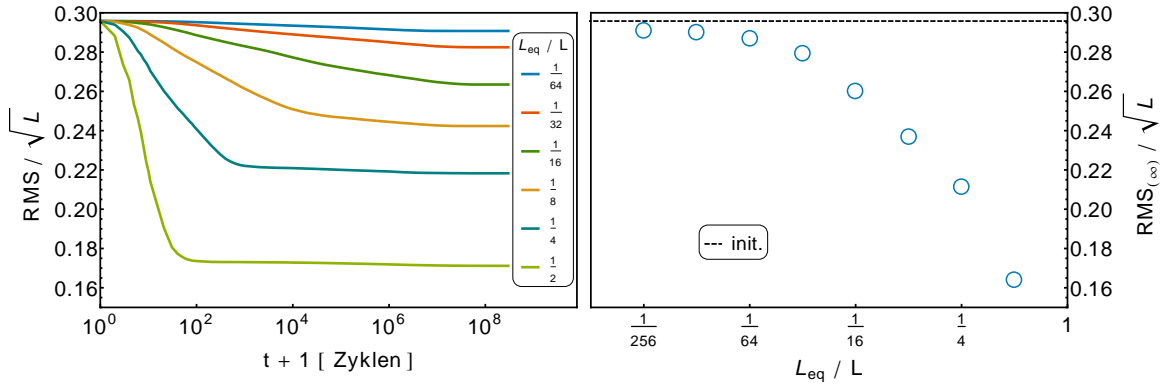


Abbildung A.10.: Links: Zeitliche Entwicklung der Root-Mean-Square-Rauigkeit für verschiedene Gleichgewichtslängen L_{eq} . Rechts: Rauigkeit der Oberflächen im stationären Zustand in Abhängigkeit von L_{eq} .

Abb. A.11 zeigt exemplarisch eine Anfangskonfiguration (init.) sowie die gleiche Oberfläche im stationären Zustand für verschiedene Gleichgewichtslängen. Der durch die Rauigkeitsmessung gewonnene Eindruck bestätigt sich: Mit zunehmendem L_{eq} wird die Konfiguration „abgeplattet“, d.h. lokale Extrema des oberen Teils der Konfiguration werden zu abgerundeten Plateaus. Die Größe/Länge dieser Plateaus wächst mit L_{eq} , übersteigt sogar scheinbar die Gleichgewichtslänge. Sowohl die Anzahl, als auch die Krümmung dieser Plateaus nimmt mit L_{eq} ab. Zwischen diesen Plateaus scheint die Konfiguration unverändert.

Um dieses Verhalten genauer zu quantifizieren, betrachten wir die Anzahl modifizierter Gitterplätze L_{mod} , d.h. aller Positionen x , für welche $h_i(x, t) \neq h_i(x, 0)$ für mindestens ein $t \leq t_{\text{max}}$. Dabei wird das arithmetische Mittel aus beiden Oberflächen betrachtet, sodass L_{mod} maximal L gleichen kann. Die zeitliche Entwicklung von L_{mod} für verschiedene Gleichgewichtslängen ist im linken Graphen von Abb. A.12 dargestellt. Mit steigender Anzahl an Deformationszyklen nimmt L_{mod} zu und erreicht nach $\approx 10^7$ Deformationszyklen (analog zu RMS) einen stationären Zustand. Sowohl der Sättigungswert als auch die Anzahl der Zyklen bis zum Erreichen des stationären Zustands gehorchen näherungsweise einem Potenzgesetz in Abhängigkeit von L_{eq} . Der Sättigungswert

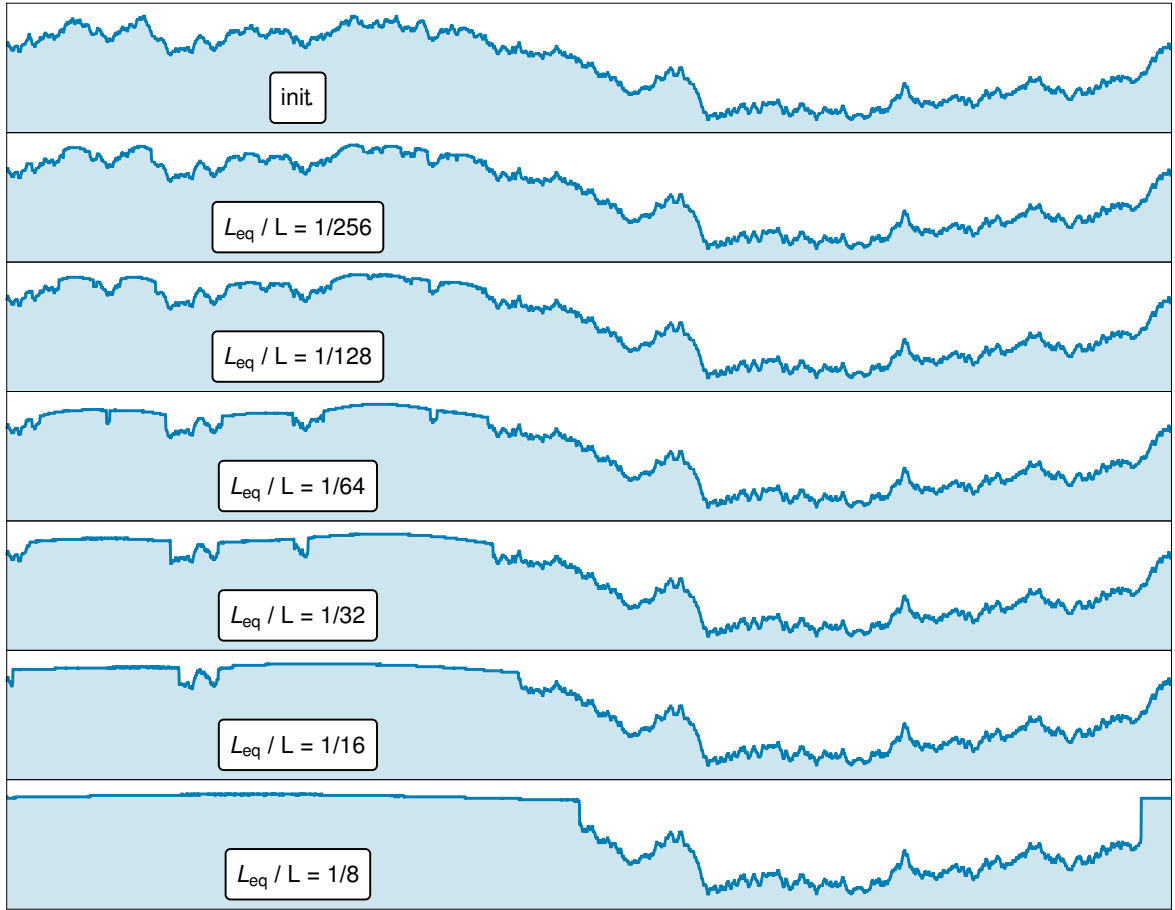


Abbildung A.11.: h_1 im stationären Zustand unter Variation von L_{eq} mit $L = 2^{12}$. Die Abbildungen wurden der Seitenbreite angepasst und sind dementsprechend in horizontaler Richtung gestaucht.

steigt dabei in etwa $\propto L_{\text{eq}}^{1/4}$, die Anzahl der Zyklen bis zum Erreichen des stationären Zustands $\propto L_{\text{eq}}^{-3/2}$ (Reskalierung im Inset dargestellt). Je kleiner L_{eq} , umso weniger Gitterplätze weichen im Limes $t \rightarrow \infty$ von der Anfangshöhe ab. Daraus folgt die wichtige Beobachtung, dass die Oberflächen im stationären Zustand nicht unabhängig von der Anfangskonfiguration sind. Des Weiteren zeigt der Exponent $1/4$, dass der Anteil modifizierter Gitterplätze L_{eq}/L weit übersteigt. Mit bis zu 10^7 Deformationszyklen bis zum Erreichen des stationären Zustands offenbart das System jedoch eine überraschend langsame Dynamik. Es wurde eine Finite-Size-Analyse durchgeführt, indem bei festem $L_{\text{eq}} = 2^6$ die Systemgröße $L = 2^n$ mit $n \in [7, \dots, 12]$ variiert wurde. Der Anteil modifizierter Gitterplätze nimmt analog zur Variation von L_{eq} mit $L^{-1/4}$ ab. Für $L \leq 2^9$ ($L_{\text{eq}}/L \geq 1/8$) weichen Zeitentwicklung und Sättigungswert vom Skalierungsverhalten mit L_{eq} ab. In einem Bereich $1 \ll L_{\text{eq}} \ll L$ kann das Potenzgesetz bestätigt werden. Interessant an dieser Analyse ist jedoch der Einfluss der Systemgröße auf die Zeitdauer bis zum Erreichen des stationären Zustands. Diese steigt nicht mit dem Exponenten $3/2$, sondern linear mit L an. Mit zunehmender Systemgröße wächst allerdings auch die Rauigkeit (Root-Mean-Square roughness $\propto \sqrt{L}$) des Systems, sodass eine längere Zeitspanne bis zum Eintritt des stationären Zustands nicht überraschend ist.

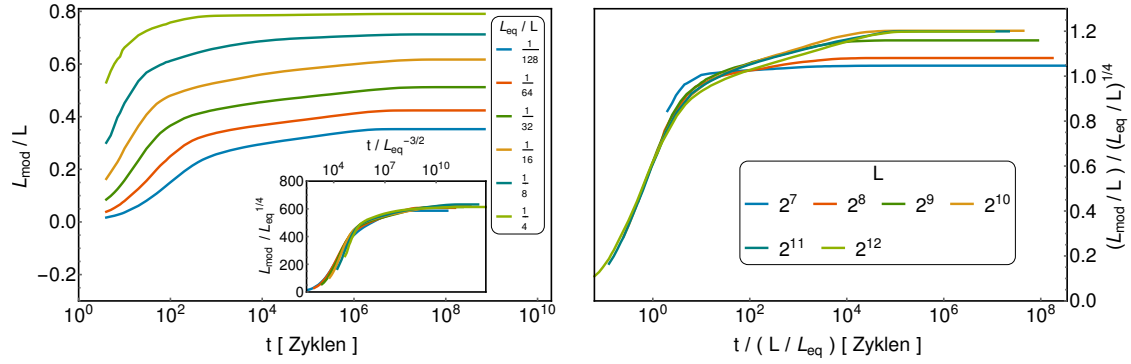


Abbildung A.12.: Zeitliche Entwicklung des Anteils modifizierter Gitterplätze unter Variation der Gleichgewichtslänge L_{eq} und $L = 2^{12}$ (links) inkl. Reskalierung (Inset). Reskalierter Anteil modifizierter Gitterplätze als Funktion der Zeit für konstante Gleichgewichtslänge $L_{eq} = 2^6$ und verschiedene Systemgrößen L (rechts).

Um Anzahl und Größe der in Abb. A.11 identifizierten Plateaus genauer zu untersuchen, widmen wir uns der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Oberflächenpositionen im stationären Zustand (Abb. A.13). Während diese für kleine L_{eq} fast einer Normalverteilung und somit der Anfangskonfiguration entspricht, wird die Verteilung für zunehmendes L_{eq} einseitig gestaucht. Es liegt die Vermutung nahe, dass die Oberfläche im stationären Zustand einer eingedrückten Random-Walk Oberfläche entspricht, d.h. alle Gitterplätze mit $h(x)$ größer einem bestimmten, L_{eq} -abhängigem Schwellwert („Eindrucktiefe“) werden umverteilt. Die abgeplattete Fläche könnte somit über die Eindrucktiefe berechnet werden und wäre im Idealfall $\propto L_{eq}$ mit einem Faktor, welcher der Verschiebung zwischen den Deformationszyklen Rechnung trägt. Die Verteilung modifizierter Gitterpositionen (Inset in Abb. A.13) zeigt jedoch, dass diese Interpretation dem Ergebnis nicht gerecht wird. Dargestellt ist sowohl die mittlere Höhe aller modifizierten Gitterpositionen $\langle h_{mod} \rangle$, als auch der Bereich zwischen 0.1 und 0.9 Quantil. Modifizierte Gitterplätze sind zwar großteils auf den Bereich $h(x) > \langle h \rangle$ beschränkt (0.1-Quantil $\approx \langle h \rangle$), hier jedoch symmetrisch um den Mittelwert $\langle h_{mod} \rangle$ verteilt (näherungsweise gleicher Abstand der Quantile zum Mittelwert) und nicht nur auf die oberen Gitterpositionen beschränkt. Dies wird wahrscheinlich durch den Verschiebungsprozess zwischen den Deformationszyklen verursacht, sodass Gipfel einer Oberfläche Täler der gegenüberliegenden Oberfläche modifizieren. Die zunehmende Abplattung spiegelt sich lediglich an der Breite dieser Verteilung, welche mit steigendem L_{eq} sinkt. Die Höhenverteilung modifizierter Gitterplätze erschwert eine einfache Quantifizierung der Plateaus.

Zur weiteren Analyse der Plateaus suchen wir deshalb in den modifizierten Gitterplätzen zusammenhängende Bereiche, d.h. Bereiche i bei welchen $h(x, t) \neq h(x, 0)$ für mindestens ein $t \leq t_{max}$ und alle $x_{min,i} \leq x \leq x_{max,i}$. Die Größe des Plateaus i entspricht dann der Länge $L_p = x_{max,i} - x_{min,i}$, wobei periodische Randbedingungen berücksichtigt werden, sollte $x_{max,i} < x_{min,i}$. Neben der Plateaugröße kann jedem Plateau i auch eine

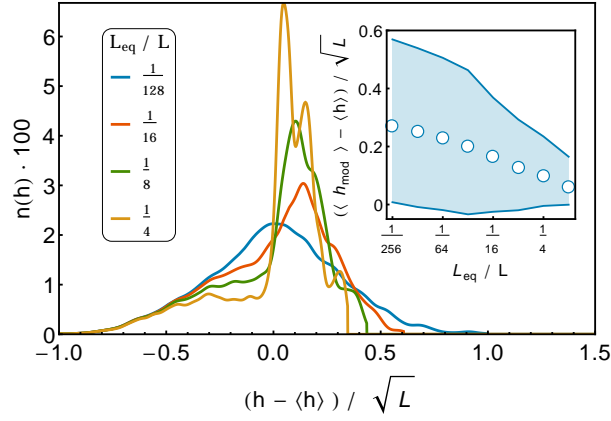


Abbildung A.13.: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Oberflächen im stationären Zustand für verschiedene L_{eq} . Der Inset zeigt die mittlere Höhe der modifizierten Gitterplätze und den Bereich zwischen dem 0.1 und 0.9 Quantil.

mittlere Höhe durch

$$h_p = \frac{1}{L_p} \sum_{x=x_{\min,i}}^{x_{\max,i}} h(x) \quad (\text{A.11})$$

zugeordnet werden. Der linke Graph in Abb. A.14 zeigt das Verhältnis aus Plateaulänge L_p und Gleichgewichtslänge in Abhängigkeit von der Plateauhöhe h_p . Zu diesem Zweck wurde die Länge aller Plateaus in einem Bereich $h \leq h_p \leq h + \sqrt{L}/10$ gemittelt. Plateaus mit einer Länge $L_p > L_{\text{eq}}$ sind im gesamten Bereich $h > \langle h \rangle$ zu finden, dabei steigt L_p näherungsweise linear mit der Plateauhöhe. Kleinere Plateaus mit Länge $\leq L_{\text{eq}}$ existieren im unteren Bereich der Oberflächen. Berücksichtigt man als Plateaus nur zusammenhängende Bereiche modifizierter Gitterplätze mit einer Länge $> L_{\text{eq}}$, kann die mittlere Plateaulänge und Anzahl der Plateaus ausgewertet werden (siehe Abb. A.14, rechts). Die so definierte mittlere Plateaulänge steigt $\propto L_{\text{eq}}$ (Faktor ≈ 3.8), während die Anzahl an Plateaus mit $L_{\text{eq}}^{-3/4}$ abnimmt.

A.2.3. Zusammenfassung und Ausblick

In dem untersuchten Modell zur plastischen Deformation wurden zwei eindimensionale random-walk Oberflächen zyklisch horizontal verschoben und gegeneinander gedrückt. Jeder Deformationsvorgang besteht aus einer plastischen Deformation bis die Kontaktlänge der Gleichgewichtslänge L_{eq} entspricht. Nach einer gewissen Anzahl an Deformationszyklen, welche mit $L_{\text{eq}}^{-3/2}$ skaliert, stellt sich ein stationärer Zustand ein, dessen Rauigkeit mit steigendem L_{eq} sinkt. Die Oberflächen sind nicht unabhängig von der Anfangskonfiguration und nicht alle Gitterplätze werden modifiziert. Dennoch zeigt das Gittermodell nicht triviales Verhalten: In einem Bereich $1 \ll L_{\text{eq}} \ll L$ steigt die Anzahl modifizierter Gitterplätze mit $(L_{\text{eq}}/L)^{1/4}$. Eine Analyse zusammenhängender modifizierter Gitterplätze zeigt, dass Plateaus auf unterschiedlicher Höhe entstehen, deren mittlere Größe $\approx 3.8L_{\text{eq}}$ entspricht und deren Anzahl $\propto L_{\text{eq}}^{-3/4}$ sinkt. Trotz dieses

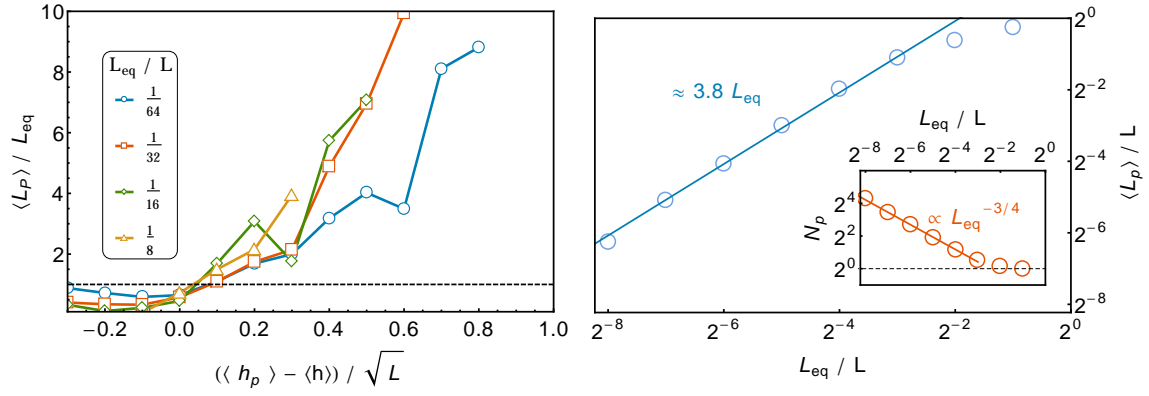


Abbildung A.14.: Links: Größe zusammenhängender modifizierter Gitterplätze als Funktion der mittleren Höhe dieser Bereiche für verschiedene L_{eq} (Intervallgröße zur Mittlung $\Delta h = \sqrt{L}/10$). Rechts: Mittlere Plateaugröße und Anzahl der Plateaus (Inset) als Funktion von L_{eq} . Dabei wurden als Plateaus alle zusammenhängenden modifizierter Gitterplätze mit Länge $> L_{eq}$ definiert.

Verhaltens konnte keine stationäre, mit L_{eq} steigende Oberflächenrauigkeit beobachtet werden. In den meisten Kontaktmodellen wird die Krümmung der Partikeloberfläche im Vergleich zum Kontaktflächenradius vernachlässigt. Aus diesem Grund scheint es zunächst plausibel, die zyklische Deformation in diesem 1+1 dimensionalen Modell zur untersuchen. Dennoch ist nicht auszuschließen, dass gerade die Krümmung der Partikel beim Verschieben der Oberflächen gegeneinander diese stationäre Rauigkeit beeinflusst. Die Berücksichtigung der Kontaktkrümmung wäre somit eine mögliche Erweiterung des Modells für weitere Untersuchungen.

Literaturverzeichnis

- [1] JAEGER, H.M. ; NAGEL, S.R.: Physics of the Granular State. In: Science 255 (1992), Nr. 5051, S. 1523
- [2] HERRMANN, H.J.: Granular Matter. In: Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 313 (2002), Nr. 1–2, S. 188 – 210. – Fundamental Problems in Statistical Physics
- [3] <https://de.wikipedia.org/wiki/Sand> 25.10.2016, 16:44 Uhr
- [4] GODDARD, J. D.: Nonlinear Elasticity and Pressure-dependent Wave Speeds in Granular Media. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences 430 (1990), Nr. 1878, S. 105–131
- [5] LIU, C.-H. ; NAGEL, S.: Sound in Sand. In: Physical Review Letters 68 (1992), S. 2301–2304
- [6] BRIE, A. ; ENDO, T. ; HOYLE, D. ; CODAZZI, D. ; ESMERSOY, K. C. and H. C. and Hsu ; DENOO, S. ; MUELLER, M. C. ; PLONA, T. ; SHENOY, R. u. a.: New Directions in Sonic Logging. In: Oilfield Review 10 (1998), Nr. 1, S. 40–55
- [7] SHARMA, R. ; BAXTER, C. ; JANDER, M.: Relationship Between Shear Wave Velocity and Stresses at Failure for Weakly Cemented Sands During Drained Triaxial Compression. In: Soils and Foundations 51 (2011), Nr. 4, S. 761–771
- [8] SEEMANN, R. ; BRINKMANN, M. ; HERMINGHAUS, S.: Auf Sand gebaut. In: Physik Journal 11 (2009), Nr. 1, S. 31
- [9] HERMINGHAUS, S.: Dynamics of Wet Granular Matter. In: Advances in Physics 54 (2005), Nr. 3, S. 221–261
- [10] WEINHART, T. ; TUNUGUNTALA, D. ; THORNTON, A. ; LUDING, S.: Physik der Lawinen. In: Physik Journal 07 (2016), S. 31–36
- [11] RAO, K.K. ; NOTT, P.R. ; SUNDARESAN, S.: An Introduction to Granular Flow. Cambridge University Press New York, 2008
- [12] HERRMANN, H.J. ; LUDING, S.: Modeling Granular Media on the Computer. In: Continuum Mechanics and Thermodynamics 10 (1998), Nr. 4, S. 189–231

- [13] ROSCOE, K. H.: The Influence of Strains in Soil Mechanics. In: Geotechnique 20 (1970), Nr. 2, S. 129–170
- [14] FENISTEIN, D. ; VAN HECKE, M.: Kinematics: Wide Shear Zones in Granular Bulk Flow. In: Nature 425 (2003), Nr. 6955, S. 256–256
- [15] MiDI, GDR: On Dense Granular Flows. In: The European Physical Journal E 14 (2004), Nr. 4, S. 341–365
- [16] LEES, A.W. ; EDWARDS, S.F.: The Computer Study of Transport Processes under Extreme Conditions. In: Journal of Physics C: Solid State Physics 5 (1972), S. 1921
- [17] CASTELLANOS, A.: The Relationship Between Attractive Interparticle Forces and Bulk Behaviour in Dry and Uncharged Fine Powders. In: Advances in Physics 54 (2005), Nr. 4, S. 263–376
- [18] KADAU, D.: Porosität in kohäsiven granularen Pulvern und Nano-Pulvern, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2004
- [19] GILABERT, F. A. ; ROUX, J.-N. ; CASTELLANOS, A.: Computer Simulation of Model Cohesive Powders: Plastic Consolidation, Structural Changes, and Elasticity Under Isotropic Loads. In: Physical Review E 78 (2008), Nr. 3, S. 031305
- [20] SUN, W. ; ZENG, Q. ; YU, K. A. and K. A. and Kendall: Calculation of Normal Contact Forces Between Silica Nanospheres. In: Langmuir 29 (2013), Nr. 25, S. 7825–7837
- [21] SUN, W. ; ZENG, Q. ; YU, A.: Calculation of Noncontact Forces Between Silica Nanospheres. In: Langmuir 29 (2013), Nr. 7, S. 2175–2184
- [22] WANG, Y. ; GU, G.S. ; WEI, F. ; WU, J.: Fluidization and Agglomerate Structure of SiO₂ Nanoparticles. In: Powder Technology 124 (2002), Nr. 1-2, S. 152–159
- [23] CASTELLANOS, A. ; VALVERDE, J. M. ; PÉREZ, A. T. ; RAMOS, A. ; WATSON, P. K.: Flow Regimes in Fine Cohesive Powders. In: Physical Review Letters 82 (1999), S. 1156–1159
- [24] CASTELLANOS, A. ; VALVERDE, J. M. ; QUINTANILLA, M. A. S.: Physics of Compaction of Fine Cohesive Particles. In: Physical Review Letters 94 (2005), S. 075501
- [25] SCHWAGER, T. ; WOLF, D. E. ; PÖSCHEL, T.: Fractal Substructure of a Nanopowder. In: Physical Review Letters 100 (2008), S. 218002
- [26] VISSCHER, W.M. ; BOLSTERLI, M.: Random Packing of Equal and Unequal Spheres in 2 and 3 Dimensions. In: Nature 239 (1972), Nr. 5374, S. 504–507

- [27] MÄDLER, L. ; ROESSLER, A. ; PRATSINIS, S.E. ; SAHM, T. ; GURLO, A. ; BAR-SAN, N. ; WEIMAR, U.: Direct Formation of Highly Porous Gas-sensing Films by in Situ Thermophoretic Deposition of Flame-made Pt/SnO₂ Nanoparticles. In: Sensors and Actuators B-Chemical 114 (2006), Nr. 1, S. 283–295
- [28] EGGERSDORFER, M. L. ; KADAU, D. ; HERRMANN, H. J. ; PRATSINIS, S.: Multiparticle Sintering Dynamics: From Fractal-like Aggregates to Compact Structures. In: Langmuir 27 (2011), Nr. 10, S. 6358–6367
- [29] RUMPF, H. ; SOMMER, K. ; STEIER, K.: Mechanisms Of Enhancing Adhesive Forces On Adhesion Of Particles By Plastic-deformation, Sintering, And Viscous Flow. In: Chemie Ingenieur Technik 48 (1976), Nr. 4, S. 300–307
- [30] MARTIN, C.L ; BORDIA, R. K.: The Effect of a Substrate on the Sintering of Constrained Films. In: Acta Materialia 57 (2009), Nr. 2, S. 549–558
- [31] THEISSMANN, R. ; FENDRICH, M. ; ZINETULLIN, R. ; GUENTHER, G. ; SCHIERING, G. ; WOLF, D. E.: Crystallographic Reorientation and Nanoparticle Coalescence. In: Physical Review B 78 (2008), S. 205413
- [32] MARTIN, S. ; NAVARRO, S. ; PALANCHER, H. ; BONNIN, A. ; LÉCHELLE, J. ; GUESSASMA, M. ; FORTIN, J. ; SALEH, K.: Validation of DEM Modeling of Sintering Using an in Situ X-ray Microtomography Analysis of the Sintering of NaCl Powder. In: Computational Particle Mechanics (2015), S. 1–8
- [33] TOMAS, J ; SCHUBERT, H: About Modeling of the Strength and the Flow Properties of Moist and Soluble Bulk Materials .2. Bulk Materials with Solid Bridges Bonding. In: Chemische Technik 34 (1982), Nr. 9, S. 459–464
- [34] HARTMANN, M. ; PALZER, S.: Caking of Amorphous Powders - Material Aspects, Modelling and Applications. In: Powder Technology 206 (2011), Nr. 1, S. 112–121
- [35] TOMAS, J: The Consolidation of Particulate Solids - Microprocesses of Caking and Kinetic Models. In: Chemie Ingenieur Technik 69 (1997), Nr. 4, S. 455–467
- [36] DEJONG, J. T. ; FRITZGES, M. B. ; NÜSSLEIN, K.: Microbially Induced Cementation to Control Sand Response to Undrained Shear. In: Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering 132 (2006), Nr. 11, S. 1381–1392
- [37] SCHULZE, D. ; SCHWEDES, J. ; LEONHARDT, C. ; KOSSERT, J.: Schüttguttechnische Auslegung eines Silos zur Lagerung von 10.000 t Schwefel. In: Schüttgut 3 (1997), S. 299–305
- [38] SCHULZE, D.: Flowability and Time Consolidation Measurements Using a Ring Shear Tester. In: Powder Handling and Processing 8 (1996), Nr. 3, S. 221–226
- [39] MARTIN, C. ; EIBLMAIER, M.: Lexikon der Geowissenschaften. Heidelberg : Spektrum Akademischer Verlag, 2000

- [40] CLOUGH, G W. ; RAD, Nader S. ; BACHUS, Robert C. ; SITAR, Nicholas: Cemented Sands Under Static Loading. In: Journal of the Geotechnical Engineering Division 107 (1981), Nr. 6, S. 799–817
- [41] ACAR, Y. B. ; EL-TAHIR, A.: Low strain dynamic properties of artificially cemented sand. In: Journal of Geotechnical Engineering 112 (1986), Nr. 11, S. 1001–1015
- [42] SCHNAID, F. ; PRIETTO, P. D. ; CONSOLI, N.C.: Characterization of Cemented Sand in Triaxial Compression. In: Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering 127 (2001), Nr. 10, S. 857–868
- [43] WANG, Y.H. ; LEUNG, S.C.: A Particulate-scale Investigation of Cemented Sand Behavior. In: Canadian Geotechnical Journal 45 (2008), Nr. 1, S. 29–44
- [44] WANG, Y.H. ; LEUNG, S.C.: Characterization of Cemented Sand by Experimental and Numerical Investigations. In: Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering 134 (2008), Nr. 7, S. 992–1004
- [45] SHOJAAEE, Z.: Shear Bands in Granular Materials : Formation and Persistence at Smooth Walls, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2012
- [46] RIES, A.: Die Rheologie eines Granulats in einer planaren Scherzelle mit glatten Wänden, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2016
- [47] SAVAGE, S. B.: The Mechanics of Rapid Granular Flows. In: Advances in applied mechanics 24 (1984), S. 289–366
- [48] NOTT, P.R.: Classical and Cosserat Plasticity and Viscoplasticity Models for Slow Granular Flow. In: Acta mechanica 205 (2009), Nr. 1-4, S. 151–160
- [49] JENKINS, J.T. ; SAVAGE, S.B.: A Theory for the Rapid Flow of Identical, Smooth, Nearly Elastic, Spherical Particles. In: Journal of Fluid Mechanics 130 (1983), S. 187–202
- [50] GOLDBIRSCH, I.: Rapid Granular Flows. In: Annual Review of Fluid Mechanics 35 (2003), Nr. 1, S. 267–293
- [51] O’HERN, C. S. ; SILBERT, L. E. ; LIU, A. J. ; NAGEL, S. R.: Jamming at Zero Temperature and Zero Applied Stress: The Epitome of Disorder. In: Physical Review E 68 (2003), S. 011306
- [52] ZHANG, H. P. ; MAKSE, H. A.: Jamming Transition in Emulsions and Granular Materials. In: Physical Review E 72 (2005), Nr. 1, S. 011301
- [53] LIU, C.H. ; NAGEL, S. R. ; SCHECTER, D.A. ; COPPERSMITH, S.N. ; MAJUMDAR, S. u. a.: Force Fluctuations in Bead Packs. In: Science 269 (1995), Nr. 5223, S. 513

- [54] RADJAÏ, F. ; WOLF, D. E. ; JEAN, M. ; MOREAU, J.-J.: Bimodal Character of Stress Transmission in Granular Packings. In: Physical Review Letters 80 (1998), Nr. 1, S. 61–64
- [55] LIU, A.J. ; NAGEL, S.R.: Nonlinear Dynamics - Jamming is not just cool any more. In: Nature 396 (1998), Nr. 6706, S. 21–22
- [56] JAEGER, H. M. ; NAGEL, S. R. ; BEHRINGER, R. P.: Granular Solids, Liquids, and Gases. In: Review of Modern Physics 68 (1996), S. 1259–1273
- [57] BAGNOLD, R. A.: Experiments on a Gravity-Free Dispersion of Large Solid Spheres in a Newtonian Fluid under Shear. In: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 225 (1954), Nr. 1160, S. 49–63
- [58] POULIQUEN, O. ; FORTERRE, Y.: A Non-local Rheology for Dense Granular Flows. In: Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 367 (2009), Nr. 1909, S. 5091–5107
- [59] KAMRIN, K. ; KOVAL, G.: Nonlocal Constitutive Relation for Steady Granular Flow. In: Physical Review Letters 108 (2012), S. 178301
- [60] HENANN, D.L. ; KAMRIN, K.: Continuum Thermomechanics of the Nonlocal Granular Rheology. In: International Journal of Plasticity 60 (2014), S. 145–162
- [61] FORTERRE, Y. ; POULIQUEN, O.: Flows of Dense Granular Media. In: Annual Review of Fluid Mechanics 40 (2008), Nr. 1, S. 1–24
- [62] DA CRUZ, F. ; EMAM, S. ; PROCHNOW, M. ; ROUX, J.N. ; CHEVOIR, F.: Rheophysics of Dense Granular Materials: Discrete Simulation of Plane Shear Flows. In: Physical Review E 72 (2005), Nr. 2, S. 21309
- [63] REYNOLDS, O.: On the Dilatancy of Media Composed of Rigid Particles in Contact. With Experimental Illustrations. In: The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 20 (1885), Nr. 127, S. 469–481
- [64] ROGNON, P.G. ; ROUX, J.-N. ; NAAÏM, M. ; CHEVOIR, F.: Dense Flows of Cohesive Granular Materials. In: Journal of Fluid Mechanics 596 (2008), S. 21–47
- [65] SHOJAAEE, Z. ; ROUX, J.-N. ; CHEVOIR, F. ; WOLF, D. E.: Shear Flow of Dense Granular Materials Near Smooth Walls. I. Shear Localization and Constitutive Laws in the Boundary Region. In: Physical Review E 86 (2012), S. 011301
- [66] KAMRIN, K. ; KOVAL, G.: Effect of Particle Surface Friction on Nonlocal Constitutive Behavior of Flowing Granular Media. In: Computational Particle Mechanics 1 (2014), Nr. 2, S. 169–176

- [67] RIES, A. ; BRENDDEL, L. ; WOLF, D.E.: Shear rate Diffusion and Constitutive Relations During Transients in Simple Shear. In: Computational Particle Mechanics (2015), S. 303–310
- [68] JOP, P. ; FORTERRE, Y. ; POULIQUEN, O.: Crucial Role of Sidewalls in Granular Surface Flows: Consequences for the Rheology. In: Journal of Fluid Mechanics 541 (2005), S. 167–192
- [69] JOP, P. ; FORTERRE, Y. ; POULIQUEN, O.: A Constitutive Law for Dense Granular Flows. In: Nature 441 (2006), Nr. 7094, S. 727–730
- [70] ALBERT, R. ; PFEIFER, M.A. ; BARABÁSI, A.-L. ; SCHIFFER, P.: Slow Drag in a Granular Medium. In: Physical Review Letters 82 (1999), Nr. 1, S. 205–208
- [71] MUETH, D.M. ; DEBREGES, G.F. ; KARCZMAR, G.S. ; ENG, P. J. ; NAGEL, S.R. ; JAEGER, H.M.: Signatures of Granular Microstructure in Dense Shear Flows. In: Nature 406 (2000), Nr. 6794, S. 385–389
- [72] CAMPBELL, C.S.: Granular Shear Flows at the Elastic Limit. In: Journal of Fluid Mechanics 465 (2002), S. 261–291
- [73] SCHWEDES, J.: Shearing Behaviour of Slightly Compressed Cohesive Granular Materials. In: Powder Technology 11 (1975), Nr. 1, S. 59 – 67
- [74] SCHWEDES, J.: Review on Testers for Measuring Flow Properties of Bulk Solids. In: Granular matter 5 (2003), Nr. 1, S. 1–43
- [75] SCHULZE, D.: Pulver und Schüttgüter. Springer Berlin Heidelberg, 2009 (VDI-Buch)
- [76] ROTHENBURG, L. ; KRUYT, N.P.: Critical State and Evolution of Coordination Number in Simulated Granular Materials. In: International Journal of Solids and Structures 41 (2004), Nr. 21, S. 5763–5774
- [77] DRUCKER, D.C. ; PRAGER, W.: Soil Mechanics and Plastic Analysis or Limit Design. In: Quarterly of Applied Mathematics 10 (1952), Nr. 2, S. 157–165
- [78] LADE, P.V. ; DUNCAN, J.M.: Elastoplastic Stress-strain Theory for Cohesionless Soil. In: Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering 101 (1975)
- [79] THORNTON, C. ; ZHANG, L.: On The Evolution of Stress and Microstructure During General 3D Deviatoric Straining of Granular Media. In: Geotechnique 60 (2010), Nr. 5, S. 333–341
- [80] NEDDERMAN, R.M.: Statics and Kinematics of Granular Materials. Cambridge University Press, 1992
- [81] RUDNICKI, J.W. ; RICE, J.R.: Conditions for the Localization of Deformation in Pressure-sensitive Dilatant Materials. In: Journal of the Mechanics and Physics of Solids 23 (1975), Nr. 6, S. 371–394

- [82] MÜHLHAUS, H.B. ; VARDOULAKIS, I.: The Thickness of Shear Bands in Granular Materials. In: Geotechnique 37 (1987), Nr. 3, S. 271–283
- [83] MOHAN, L. S. ; RAO, K. K. ; NOTT, P. R.: A Frictional Cosserat Model for the Slow Shearing of Granular Materials. In: Journal of Fluid Mechanics 457 (2002), S. 377–409
- [84] TORBAHN, L. ; WEUSTER, A. ; HANDL, L. ; SCHMIDT, V. ; KWADE, A. ; WOLF, D.E.: Mesostructural Investigation of Micron-sized Glass Particles During Shear Deformation - An Experimental Approach vs. DEM Simulation. In: Powders and Grains, 2017. – submitted
- [85] LUDING, S: Micro-macro Transition for Anisotropic, Frictional Granular Packings. In: International Journal of Solids and Structures 41 (2004), Nr. 21, S. 5821–5836
- [86] PÖSCHEL, T. ; SCHWAGER, T.: Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms. Springer Science & Business Media, 2005
- [87] BRENDL, L. ; UNGER, T. ; WOLF, D. E.: Contact Dynamics for Beginners. In: The Physics of Granular Media, 2005, S. 325–343
- [88] CUNDALL, P.A. ; STRACK, O.D.L.: A discrete numerical model for granular assemblies. In: Géotechnique 29, Issue 1 (1979), S. 47–65
- [89] WALTON, O.R.: Force Models for Particle-Dynamics Simulations of Granular Materials. In: Mobile Particulate Systems. Kluwer Academic Publishers, Boston, MA., 1995, S. 367–380
- [90] JOHNSON, K. L.: Contact Mechanics. Cambridge University Press, 1987
- [91] HERTZ, H.: Über die Berührung fester elastischer Körper. In: Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelle's Journal) 1882 (1882), Nr. 92, S. 156–171
- [92] SCHWAGER, T. ; PÖSCHEL, T.: Coefficient of Restitution and Linear-dashpot Model Revisited. In: Granular Matter 9 (2007), Nr. 6, S. 465–469
- [93] BRILLIANTOV, N.V. ; SPAHN, F. ; HERTZSCH, J.M. ; PÖSCHEL, T.: Model for Collisions in Granular Gases. In: Physical review E 53 (1996), Nr. 5, S. 5382–5392
- [94] TSUJI, Y. ; TANAKA, T. ; ISHIDA, T.: Lagrangian Numerical-simulation of Plug Flow of Cohesionless Particles in a Horizontal Pipe. In: Powder Technology 71 (1992), Nr. 3, S. 239–250
- [95] WALTON, O.R. ; BRAUN, R.L.: Viscosity, Granular-Temperature, and Stress Calculations for Shearing Assemblies of Inelastic, Frictional Disks. In: Journal of Rheology 30 (1986), Nr. 5, S. 949–980
- [96] TOMAS, J.: Adhesion of Ultrafine Particles - A Micromechanical Approach. In: Chemical Engineering Science 62 (2007), Nr. 7, S. 1997–2010

- [97] THORNTON, C. ; YIN, K.K.: Impact of Elastic Spheres with and without Adhesion. In: Powder technology 65 (1991), Nr. 1, S. 153–166
- [98] BRILLIANTOV, N. V. ; ALBERS, N. ; SPAHN, F. ; PÖSCHEL, T.: Collision Dynamics of Granular Particles with Adhesion. In: Physical Review E 76 (2007), Nr. 5, Part 1, S. 051302
- [99] THORNTON, C. ; NING, Z.M.: A Theoretical Model for the Stick/bounce Behaviour of Adhesive, Elastic-plastic Spheres. In: Powder Technology 99 (1998), Nr. 2, S. 154–162
- [100] LUDING, S.: Cohesive, Frictional Powders: Contact Models for Tension. In: Granular Matter 10 (2008), S. 235–246
- [101] PASHA, S. M. and D. M. and Dogbe ; HARE, C. ; HASSANPOUR, A. ; GHADIRI, M.: A Linear Model of Elasto-plastic and Adhesive Contact Deformation. In: Granular Matter 16 (2014), Nr. 1, S. 151–162
- [102] JIANG, M.J. ; YU, H.S. ; HARRIS, D.: A Novel Discrete Model for Granular Material Incorporating Rolling Resistance. In: Computers and Geotechnics 32 (2005), Nr. 5, S. 340–357
- [103] PÖSCHEL, T. ; SCHWAGER, T. ; BRILLIANTOV, N.V.: Rolling Friction of a Hard Cylinder on a Viscous Plane. In: European Physical Journal B 10 (1999), Nr. 1, S. 169–174
- [104] ZHOU, Y. C. ; WRIGHT, B. D. ; YANG, R. Y. ; XU, B. H. ; YU, A. B.: Rolling Friction in the Dynamic Simulation of Sandpile Formation. In: Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 269 (1999), Nr. 2-4, S. 536 – 553
- [105] HEIM, L.-O. ; BLUM, J. ; PREUSS, M. ; BUTT, H.J.: Adhesion and Friction Forces between Spherical Micrometer-Sized Particles. In: Physical Review Letters 83 (1999), Nr. 16, S. 3328–3331
- [106] FUCHS, R. ; WEINHART, T. ; MEYER, J. ; ZHUANG, H. ; STAEDLER, T. ; JIANG, X. ; LUDING, S.: Rolling, Sliding and Torsion of Micron-sized Silica Particles: Experimental, Numerical and Theoretical Analysis. In: Granular matter 16 (2014), Nr. 3, S. 281–297
- [107] PLIMPTON, S.: Fast Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics. In: Journal of Computational Physics 117 (1995), Nr. 1, S. 1–19
- [108] SILBERT, L. E. ; ERTAS, D. ; GREY, G. S. ; HALSEY, T. C. ; LEVINE, D. ; PLIMPTON, S.J.: Granular Flow Down an Inclined Plane: Bagnold Scaling and Rheology. In: Physical Review E 64 (2001), Nr. 5, S. 051302
- [109] ALLEN, M.P. ; TILDESLEY, D.J.: Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, 1989

- [110] CHRISTOFFERSEN, J. ; MEHRABADI, M.M. ; NEMAT-NASSER, S.: A Micromechanical Description of Granular Material Behavior. In: Journal of Applied Mechanics 48 (1981), Nr. 2, S. 339–344
- [111] ROTHENBURG, L. ; SELVADURAI, A.P.S.: A Micromechanical Definition of the Cauchy Stress Tensor for Particulate Media. In: Proceedings of the International Symposium on Mechanical Behaviour of Structured Materials, 1981, S. 469–486
- [112] BARDET, J.P. ; VARDOULAKIS, I.: The Asymmetry of Stress in Granular Media. In: International Journal of Solids and Structures 38 (2001), Nr. 2, S. 353–367
- [113] GOLDBIRSCH, I.: Stress, Stress Asymmetry and Couple Stress: From Discrete Particles to Continuous Fields. In: Granular Matter 12 (2010), Nr. 3, S. 239–252
- [114] BOLTACHEV, G. S. ; VOLKOV, N. B. ; KOCHURIN, E. A. ; MAXIMENKO, A. L. ; SHTERN, M. B. ; KIRKOVA, E. G.: Simulation of the Macromechanical Behavior of Oxide Nanopowders During Compaction Processes. In: Granular Matter 17 (2015), Nr. 3, S. 345–358
- [115] VIGGIANI, G. ; ANDO, E. ; JAQUET, C. ; TALBOT, H.: Identifying and Following Particle-to-particle Contacts in Real Granular Media: An Experimental Challenge. In: Powders & Grains, 2013
- [116] MORENO-ATANASIO, R. ; WILLIAMS, R. A. ; JIA, X.: Combining X-ray Microtomography with Computer Simulation for Analysis of Granular and Porous Materials. In: Particuology 8 (2010), Nr. 2, S. 81–99
- [117] STREGE, S: Röntgenmikrotomographische Analyse der Verdichtung und Scherung feiner und kohäsiver Pulver, Institut für Partikeltechnik - Technische Universität Braunschweig, Diss., 2014
- [118] THORNTON, C: Numerical Simulations of Deviatoric Shear Deformation of Granular Media. In: Geotechnique 50 (2000), Nr. 1, S. 43–53
- [119] CAMBOU, B. ; JEAN, M. ; RADJAÏ, F. u. a.: Micromechanics of Granular Materials. Wiley Online Library, 2009
- [120] KANATANI, K.-I.: Distribution of directional-data and Fabric Tensors. In: International Journal of Engineering Science 22 (1984), Nr. 2, S. 149–164
- [121] IMOLE, O. I. ; WOJTKOWSKI, M. ; MAGNANIMO, V. ; LUDING, S.: Micro-macro Correlations and Anisotropy in Granular Assemblies under Uniaxial Loading and Unloading. In: Physical Review E 89 (2014), Nr. 4, S. 042210
- [122] STREGE, S. ; WEUSTER, A. ; ZETZENER, H. ; BRENDDEL, L. ; KWADÉ, A. ; WOLF, D.E.: Approach to Structural Anisotropy in Compacted Cohesive Powder. In: Granular Matter 16 (2014), Nr. 3, S. 401–409
- [123] TOPIC, N. ; WEUSTER, A. ; PÖSCHEL, T. ; WOLF, D.E.: Structure of a Three-dimensional Nano-powder Subjected to Repeated Fragmentation and Sedimentation. In: New Journal of Physics 17 (2015), Nr. 1, S. 013024

- [124] WEINHART, T. ; THORNTON, A. R. ; LUDING, S. ; BOKHOVE, O.: From Discrete Particles to Continuum Fields Near a Boundary. In: Granular Matter 14 (2012), Nr. 2, S. 289–294
- [125] VALVERDE, J. M. ; QUINTANILLA, M. A. S. ; CASTELLANOS, A.: Jamming Threshold of Dry Fine Powders. In: Physical Review Letters 92 (2004), S. 258303
- [126] GILABERT, F. A. ; ROUX, J.-N. ; CASTELLANOS, A.: Computer Simulation of Model Cohesive Powders: Influence of Assembling Procedure and Contact Laws on Low Consolidation States. In: Physical Review E 75 (2007), Nr. 1, S. 011303
- [127] SHAEBANI, M. R. ; UNGER, T. ; KERTESZ, J.: Generation of Homogeneous Granular Packings: Contact Dynamics Simulations at Constant Pressure Using Fully Periodic Boundaries. In: International Journal of Modern Physics C 20 (2009), Nr. 06, S. 847–867
- [128] ESTRADA, N. ; LIZCANO, A. ; TABOADA, A.: Simulation of Cemented Granular Materials. I. Macroscopic Stress-strain Response and Strain Localization. In: Physical Review E 82 (2010), S. 011303
- [129] SUTHERLAND, D.N. ; GOODARZ-NIA, I.: Floc Simulation: The Effect of Collision Sequence. In: Chemical Engineering Science 26 (1971), Nr. 12, S. 2071–2085
- [130] SMIRNOV, B.M.: The Properties of Fractal Clusters. In: Physics Reports (Review Section Of Physics Letters) 188 (1990), Nr. 1, S. 1–78
- [131] MEAKIN, P.: Effects of Cluster Trajectories on Cluster-cluster Aggregation: A Comparison of Linear and Brownian Trajectories in Two- and Three-dimensional Simulations. In: Physical Review A 29 (1984), S. 997–999
- [132] ROGNON, P. G. ; MILLER, T. ; METZGER, B. ; EINAV, I.: Long-range Wall Perturbations in Dense Granular Flows. In: Journal of Fluid Mechanics 764 (2015), S. 171–192
- [133] LOIS, G. ; LEMAÎTRE, A. ; CARLSON, J. M.: Numerical Tests of Constitutive Laws for Dense Granular Flows. In: Physical Review E 72 (2005), S. 051303
- [134] UNGER, T.: Collective Rheology in Quasi Static Shear Flow of Granular Media. In: arXiv preprint arXiv:1009.3878 (2010)
- [135] TIGHE, B. P.: Critical Viscoelastic Response in Jammed Solids. In: arXiv preprint arXiv:1205.2960 (2012)
- [136] BESSELING, R. ; ISA, L. ; BALLESTA, P. ; PETEKIDIS, G. ; CATES, M. E. ; POON, W. C. K.: Shear Banding and Flow-Concentration Coupling in Colloidal Glasses. In: Physical Review Letters 105 (2010), S. 268301
- [137] POPOV, V.L.: Kontaktmechanik und Reibung. Springer, Heidelberg, 2009
- [138] LUDING, S.: Collisions & Contacts Between Two Particles. In: NATO ASI Series E Applied Sciences-Advanced Study Institute 350 (1998), S. 285–304

- [139] JOHNSON, K.L. ; KENDALL, K. ; ROBERTS, A.D.: Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 324 (1971), Nr. 1558, S. 301–313
- [140] DERJAGUIN, B.V. ; MULLER, V.M. ; TOPOROV, Y.P.: Effect Of Contact Deformations On Adhesion Of Particles. In: Journal Of Colloid And Interface Science 53 (1975), Nr. 2, S. 314–326
- [141] TOMAS, J ; SCHUBERT, H: About Modeling of the Strength and the Flow Properties of Moist and Soluble Mineral Bulk Materials .1. Bulk Materials with Liquid Bridges Bonding. In: Chemische Technik 34 (1982), Nr. 3, S. 130–134
- [142] BOWDEN, F.P. ; TABOR, D.: Friction: An Introduction to Tribology. RE Krieger Publishing Company, 1973
- [143] MINDLIN, R.D.: Compliance of Elastic Bodies in Contact. In: Journal Of Applied Mechanics-transactions Of The Asme 16 (1949), Nr. 3, S. 259–268
- [144] MINDLIN, R.D. ; DERESIEWICZ, H.: Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces. In: Journal of Applied Mechanics-transactions Of The Asme 20 (1953), Nr. 3, S. 327–344
- [145] ELATA, D. ; BERRYMAN, J. G.: Contact Force-displacement Laws and the Mechanical Behavior of Random Packs of Identical Spheres. In: Mechanics of Materials 24 (1996), Nr. 3, S. 229–240
- [146] SCHÄFER, J. ; DIPPEL, S. ; WOLF, D.E.: Force Schemes in Simulations of Granular Materials. In: Journal de physique I 6 (1996), Nr. 1, S. 5–20
- [147] FOERSTER, S.F. ; LOUGE, M.Y. ; CHANG, A.H. ; ALLIA, K.: Measurements of the Collision Properties of Small Spheres. In: Physics of Fluids 6 (1994), Nr. 3, S. 1108–1115
- [148] LABOUS, L. ; ROSATO, A. D. ; DAVE, R. N.: Measurements of Collisional Properties of Spheres Using High-speed Video Analysis. In: Physical Review E 56 (1997), Nr. 5, S. 5717–5725
- [149] BRENDL, L. ; DIPPEL, S.: Lasting Contacts in Molecular Dynamics Simulations. In: NATO ASI Series E Applied Sciences-Advanced Study Institute 350 (1998), S. 313–318
- [150] KADAU, D. ; BARTELS, G. ; BRENDL, L. ; WOLF, D.E.: Pore Stabilization in Cohesive Granular Systems. In: Phase Transitions 76 (2003), Nr. 4-5, S. 315–331
- [151] BARTELS, G. ; UNGER, T. ; KADAU, D. ; WOLF, D. E. ; KERTÉSZ, J.: The Effect of Contact Torques on Porosity of Cohesive Powders. In: Granular Matter 7 (2005), Nr. 2-3, S. 139–143
- [152] FRIEDLANDER, S. K.: Dust, Smoke and Haze. 2nd. Oxford University Press, 2000

- [153] GREENWOOD, J. ; TABOR, D. ; MINSHALL, H.: Hysteresis Losses in Rolling and Sliding Friction. In: Proceedings Of The Royal Society Of London Series A-mathematical And Physical Sciences 259 (1961), Nr. 129, S. 480
- [154] BRILLIANTOV, N.V. ; PÖSCHEL, T.: Rolling Friction of a Viscous Sphere on a Hard Plane. In: Europhysics Letters 42 (1998), Nr. 5, S. 511
- [155] DOMINIK, C. ; TIELENS, A.: Resistance to Rolling in the Adhesive Contact of 2 Elastic Spheres. In: Philosophical Magazine A-physics Of Condensed Matter Structure Defects And Mechanical Properties 72 (1995), Nr. 3, S. 783–803
- [156] WENSRICH, C. M. ; KATTERFELD, A.: Rolling Friction as a Technique For Modelling Particle Shape in DEM. In: Powder Technology 217 (2012), S. 409–417
- [157] ESTRADA, N. ; AZÉMA, E. ; RADJAÏ, F. ; TABOADA, A.: Identification of Rolling Resistance as a Shape Parameter in Sheared Granular Media. In: Physical Review E 84 (2011), S. 011306
- [158] ANDERSEN, H.C.: Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature. In: The Journal of Chemical Physics 72 (1980), S. 2384
- [159] PARRINELLO, M ; RAHMAN, A: Polymorphic Transitions in Single-crystals - A New Molecular-dynamics Method. In: Journal of Applied Physics 52 (1981), Nr. 12, S. 7182–7190
- [160] AGNOLIN, I. ; ROUX, J.-N.: Internal States of Model Isotropic Granular Packings. I. Assembling Process, Geometry, and Contact Networks. In: Physical Review E 76 (2007), Nr. 6, S. 061302
- [161] CAMPBELL, C.S.: Stress-controlled Elastic Granular Shear Flows. In: Journal Of Fluid Mechanics 539 (2005), S. 273–297
- [162] ROGNON, P.G. ; ROUX, J.-N. ; CHEVOIR, F. ; NAAÏM, M.: Rheology of Cohesive Granular Materials. In: Powders and Grains, 2005
- [163] VARNIK, F. ; MANDAL, S. ; CHIKKADI, V. ; DENISOV, D. ; OLSSON, P. ; VÅGBERG, D. ; RAABE, D. ; SCHALL, P.: Correlations of Plasticity in Sheared Glasses. In: Physical Review E 89 (2014), S. 040301
- [164] MANDAL, S. ; GROSS, M. ; RAABE, D. ; VARNIK, F.: Heterogeneous Shear in Hard Sphere Glasses. In: Physical Review Letters 108 (2012), S. 098301
- [165] CAMPBELL, C.S.: Clusters in Dense-inertial Granular Flows. In: Journal Of Fluid Mechanics 687 (2011), S. 341–359
- [166] ROGNON, P.G. ; ROUX, J.-N. ; WOLF, D.E. ; NAAÏM, M. ; CHEVOIR, F.: Rheophysics of Cohesive Granular Materials. In: Europhysics Letters 74 (2006), S. 644
- [167] EVANS, D.J. ; MORRISS, G.P.: Non-Newtonian Molecular-dynamics. In: Computer Physics Reports 1 (1984), Nr. 6, S. 297–343

- [168] BOBERSKI, J. ; SHAEBANI, M.R. ; WOLF, D.E.: Anisotropy of Force Distributions in Sheared Soft-particle Systems. In: Europhysics Letters 108 (2014), Nr. 4, S. 44002
- [169] WEUSTER, A. ; BRENDDEL, L. ; WOLF, D. E.: Simulation of Sheared, Caking Powder. In: Powders and Grains, 2013
- [170] MOREAU, J. J.: Some Numerical Methods in Multibody Dynamics: Application to Granular Materials. In: European Journal of Mechanics. A. Solids 13 (1994), S. 93–114
- [171] JEAN, M.: The Non-smooth Contact Dynamics Method. In: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 177 (1999), Nr. 3, S. 235–257
- [172] BATHURST, R.J. ; ROTHENBURG, L.: Micromechanical Aspects of Isotropic Granular Assemblies with Linear Contact Interactions. In: Journal of Applied Mechanics-transactions of the ASME 55 (1988), Nr. 1, S. 17–23
- [173] LUDING, S. ; CLÉMENT, E. ; BLUMEN, A. ; RAJCHENBACH, J. ; DURAN, J.: Anomalous Energy Dissipation in Molecular-dynamics Simulations of Grains: The “detachment” Effect. In: Physical Review E 50 (1994), Nr. 5, S. 4113–4122
- [174] MORGENEYER, M. ; ROECK, M. ; SCHWEDES, J. ; BRENDDEL, L. ; JOHNSON, K. ; KADAU, D. ; WOLF, D.E. ; HEIM, L.-O.: Compaction and Mechanical Properties of Cohesive Granular Media. In: Schriftenreihe Mechanische Verfahrenstechnik: Behavior of Granular Media 9 (2006), S. 107–134
- [175] SHAEBANI, M. R. ; MADADI, M. ; LUDING, S. ; WOLF, D. E.: Influence of Polydispersity on Micromechanics of Granular Materials. In: Physical Review E 85 (2012), S. 011301
- [176] VOIVRET, C. ; RADJAÏ, F. ; DELENNE, J.-Y. ; EL YOUSOUFI, M. S.: Multiscale Force Networks in Highly Polydisperse Granular Media. In: Physical Review Letters 102 (2009), S. 178001
- [177] POULIQUEN, O. ; FORTERRE, Y. ; LE DIZES, S.: Slow Dense Granular Flows as a Self-induced Process. In: Advances in complex systems 4 (2001), Nr. 04, S. 441–450
- [178] GOYON, J. ; COLIN, A. ; OVARLEZ, G. ; AJDARI, A. ; BOCQUET, L.: Spatial Cooperativity in Soft Glassy Flows. In: Nature 454 (2008), Nr. 7200, S. 84–87
- [179] BOCQUET, L. ; COLIN, A. ; AJDARI, A.: Kinetic Theory of Plastic Flow in Soft Glassy Materials. In: Physical Review Letters 103 (2009), Nr. 3, S. 036001
- [180] POULIQUEN, O.: Velocity Correlations in Dense Granular Flows. In: Physical Review Letters 93 (2004), S. 248001
- [181] RIES, A. ; BRENDDEL, L. ; WOLF, D.E.: The Cooperativity Length in Simple Shear of Dry Granular Media. In: Computational Particle Mechanics (2016)

- [182] RADJAÏ, F. ; ROUX, S.: Turbulentlike Fluctuations in Quasistatic Flow of Granular Media. In: Physical Review Letters 89 (2002), Nr. 6, S. 064302
- [183] MILLER, T. ; ROGNON, P. ; METZGER, B. ; EINAV, I.: Eddy Viscosity in Dense Granular Flows. In: Physical Review Letters 111 (2013), S. 058002
- [184] HEUSSINGER, C.: Shear Thickening in Granular Suspensions: Interparticle Friction and Dynamically Correlated Clusters. In: Physical Review E 88 (2013), S. 050201
- [185] CAMPBELL, C.S.: Clusters in Dense-inertial Granular Flows: Two New Views of the Conundrum. In: Granular Matter 16 (2014), Nr. 5, S. 621–626
- [186] VALVERDE, J. M. ; CASTELLANOS, A.: Compaction of Fine Powders: From Fluidized Agglomerates to Primary Particles. In: Granular Matter 9 (2007), Nr. 1-2, S. 19–24
- [187] MILLS, P. ; ROGNON, P. G. ; CHEVOIR, F.: Rheology and Structure of Granular Materials Near the Jamming Transition. In: Europhysics Letters 81 (2008), Nr. 6, S. 64005
- [188] MAJMUDAR, T.S. ; BEHRINGER, R.P.: Contact Force Measurements and Stress-induced Anisotropy in Granular Materials. In: Nature 435 (2005), Nr. 7045, S. 1079–1082
- [189] LOIS, G. ; LEMAÎTRE, A. ; CARLSON, J. M.: Spatial Force Correlations in Granular Shear Flow. I. Numerical Evidence. In: Physical Review E 76 (2007), S. 021302
- [190] TÖRÖK, J. ; KRISHNAMURTHY, S. ; KERTÉSZ, J. ; ROUX, S.: Self-Organization, Localization of Shear Bands, and Aging in Loose Granular Materials. In: Physical Review Letters 84 (2000), S. 3851–3854
- [191] TÖRÖK, J. ; KRISHNAMURTHY, S. ; KERTÉSZ, J. ; ROUX, S.: Shearing of loose granular materials: A statistical mesoscopic model. In: Physical Review E 67 (2003), S. 021303
- [192] HERRMANN, H. J.: Structures in Deformed Granular Packings. In: Granular Matter 3 (2001), Nr. 1-2, S. 15–18
- [193] SAVAGE, S.B.: Analyses of Slow High-concentration Flows of Granular Materials. In: Journal of Fluid Mechanics 377 (1998), S. 1–26
- [194] CUNDALL, P.A.: Numerical Experiments on Localization in Frictional Materials. In: Ingenieur Archiv 59 (1989), Nr. 2, S. 148–159
- [195] WILLIAMS, J. R. ; REGE, N.: Coherent Vortex Structures in Deforming Granular Materials. In: Mechanics of Cohesive-frictional Materials 2 (1997), Nr. 3, S. 223–236

- [196] THORNTON, C ; ZHANG, L: A Numerical Examination of Shear Banding and Simple Shear Non-coaxial Flow Rules. In: Philosophical Magazine 86 (2006), Nr. 21-22, S. 3425–3452
- [197] ROGNON, P. ; EINAV, I.: Thermal Transients and Convective Particle Motion in Dense Granular Materials. In: Physical Review Letters 105 (2010), S. 218301
- [198] TORDESILLAS, A. ; PUCILOWSKI, S. ; LIN, Q. ; PETERS, J.F. ; BEHRINGER, R.P.: Granular Vortices: Identification, Characterization and Conditions for the Localization of Deformation. In: Journal of the Mechanics and Physics of Solids 90 (2016), S. 215 – 241
- [199] ROGNON, P. ; MILLER, T. ; EINAV, I.: A Circulation-based Method for Detecting Vortices in Granular Materials. In: Granular Matter (2015), S. 1–12
- [200] PRANDTL, L.: Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz. In: Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik 5 (1925), Nr. 2, S. 136–139
- [201] MAGIERA, M.P.: Magnetic Friction in Driven Heisenberg-like Systems, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2013
- [202] PETRAVIC, J. ; EVANS, D. J.: Approach to the Non-equilibrium time-periodic State in a ‘steady’shear Flow Model. In: Molecular Physics 95 (1998), Nr. 2, S. 219–231
- [203] HUCHT, A.: On the Symmetry of Universal Finite-size Scaling Functions in Anisotropic Systems. In: Journal of Physics A: Mathematical and General 35 (2002), Nr. 31, S. L481
- [204] OLSSON, P. ; TEITEL, S.: Critical Scaling of Shear Viscosity at the Jamming Transition. In: Physical Review Letters 99 (2007), S. 178001
- [205] STEGMANN, T. ; TÖRÖK, J. ; BRENDL, L. ; WOLF, D.E.: Minimal Dissipation Theory and Shear Bands in Biaxial Tests. In: Granular Matter 13 (2011), Nr. 5, S. 565–572
- [206] GENNES, P. G.: Granular Matter: A Tentative View. In: Reviews of Modern Physics 71 (1999), S. S374–S382
- [207] TABOADA, A. ; ESTRADA, N. ; RADJAÏ, F.: Additive Decomposition of Shear Strength in Cohesive Granular Media from Grain-Scale Interactions. In: Physical Review Letters 97 (2006), S. 098302
- [208] ESTRADA, N. ; TABOADA, A. ; RADJAÏ, F.: Shear Strength and Force Transmission in Granular Media with Rolling Resistance. In: Physical Review E 78 (2008), Nr. 2, 1
- [209] STARON, L. ; RADJAÏ, F.: Friction Versus Texture at the Approach of a Granular Avalanche. In: Physical Review E 72 (2005), S. 041308

- [210] GOLDENBERG, C. ; GOLDBIRSCH, I.: Friction Enhances Elasticity in Granular Solids. In: Nature 435 (2005), Nr. 7039, S. 188–191
- [211] JANSSEN, H. A.: Versuche über Getreidedruck in Silozellen. In: Zeitschrift des Vereines deutscher Ingenieure 39 (1895), S. 1045–1049
- [212] PEYNEAU, P.-E. ; ROUX, J.-N.: Frictionless Bead Packs Have Macroscopic Friction, but no Dilatancy. In: Physical Review E 78 (2008), S. 011307
- [213] SOMFAI, E. ; VAN HECKE, M. ; ELLENBROEK, W. G. ; SHUNDYAK, K. ; VAN SAARLOOS, W.: Critical and Noncritical Jamming of Frictional Grains. In: Physical Review E 75 (2007), S. 020301
- [214] LUDING, S.: The Effect of Friction on Wide Shear Bands. In: Particulate Science and Technology 26 (2008), Nr. 1, S. 33–42
- [215] WEUSTER, A. ; STREGE, S. ; BRENDL, L. ; ZETZENER, H. ; WOLF, D.E. ; KWADDE, A.: Shear Flow of Cohesive Powders with Contact Crystallization: Experiment, Model and Calibration. In: Granular Matter 17 (2015), Nr. 2, S. 271–286
- [216] ODA, M. ; KONISHI, J. ; NEMAT-NASSER, S.: Experimental Micromechanical Evaluation of Strength of Granular Materials: Effects of Particle Rolling. In: Mechanics of Materials 1 (1982), Nr. 4, S. 269–283
- [217] ESTRADA, N. ; TABOADA, A. ; RADJAÏ, F.: Shear Strength and Fabric Properties in Granular Media with Interlocked Particles. In: Powders And Grains, 2009
- [218] ISRAELACHVILI, J. N.: Intermolecular and Surface Forces: Revised Third Edition. Academic press, 2011
- [219] TOMAS, J.: Product Design of Cohesive Powders - Mechanical Properties, Compression and Flow Behavior. In: Chemical Engineering & Technology 27 (2004), Nr. 6, S. 605–618
- [220] LUDING, S.: Shear Flow Modeling of Cohesive and Frictional Fine Powder. In: Powder Technology 158 (2005), Nr. 1-3, S. 45–50
- [221] WOLF, D.E. ; PÖSCHEL, T. ; SCHWAGER, T. ; WEUSTER, A. ; BRENDL, L.: Fractal Substructures due to Fragmentation and Reagglomeration. In: Powders and Grains, 2009
- [222] AARONS, S. ; SUNDARESAN, S.: Shear Flow of Assemblies of Cohesive and Non-cohesive Granular Materials. In: Powder Technology 169 (2006), Nr. 1, S. 10 – 21
- [223] AARONS, S. ; SUNDARESAN, S.: Shear Flow of Assemblies of Cohesive Granular Materials under Constant Applied Normal Stress. In: Powder Technology 183 (2008), Nr. 3, S. 340 – 355

- [224] DELENNE, J.-Y. ; EL YOUSOUFI, M. S. ; CHERBLANC, F. ; BÉNET, J.-C.: Mechanical Behaviour and Failure of Cohesive Granular Materials. In: International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 28 (2004), Nr. 15, S. 1577–1594
- [225] WOLF, D. E. ; UNGER, T. ; KADAU, D. ; BRENDDEL, L.: Compaction of Cohesive Powders. In: Powders and Grains, 2005
- [226] ROCK, M. ; MORGENEYER, M. ; SCHWEDES, J. ; KADAU, D. ; BRENDDEL, L. ; WOLF, D.: Steady State Flow of Cohesive and Non-cohesive Powders: Investigations in Experiment and Simulation. In: Granular Matter 10 (2008), Nr. 4, S. 285–293
- [227] HILL, R.: The Mathematical Theory of Plasticity. Bd. 11. Oxford University Press, 1998. – S. 294 ff.
- [228] KADAU, D. ; HERRMANN, H. J.: Density Profiles of Loose and Collapsed Cohesive Granular Structures Generated by Ballistic Deposition. In: Physical Review E 83 (2011), S. 031301
- [229] AGNOLIN, I. ; ROUX, J.-N.: Internal States of Model Isotropic Granular Packings. II. Compression and Pressure Cycles. In: Physical Review E 76 (2007), Nr. 6, S. 061303
- [230] GILABERT, F. ; ROUX, J.-N. ; CASTELLANOS, A.: Structural Changes and Plasticity in Loose Cohesive Granular Packings. In: Powders and Grains, 2005
- [231] EGGERSDORFER, M.L. ; KADAU, D. ; HERRMANN, H.J. ; PRATSINIS, S.E.: Fragmentation and Restructuring of Soft-agglomerates under Shear. In: Journal of Colloid and Interface Science 342 (2010), Nr. 2, S. 261 – 268
- [232] GELLATLY, B.J. ; FINNEY, J.L.: Characterisation of Models of Multicomponent Amorphous Metals: The Radical Alternative to the Voronoi Polyhedron. In: Journal of Non-Crystalline Solids 50 (1982), Nr. 3, S. 313–329
- [233] MEDVEDEV, N.N.: The Extension of the Voronoi-delaunay Method to Describe a Void Space Inside Polydisperse Ball Packings. In: Doklady Akademii Nauk Bd. 337, 1994, S. 767–771
- [234] SASTRY, S. ; CORTI, D. S. ; DEBENEDETTI, P.G. ; STILLINGER, F.H.: Statistical Geometry of Particle Packings. I. Algorithm for Exact Determination of Connectivity, Volume, and Surface Areas of Void Space in Monodisperse and Polydisperse Sphere Packings. In: Physical Review E 56 (1997), Nr. 5, S. 5524
- [235] BREWSTER, R. ; SILBERT, L. E. ; GREEST, G. S. ; LEVINE, A. J.: Relationship Between Interparticle Contact Lifetimes and Rheology in Gravity-driven Granular Flows. In: Physical Review E 77 (2008), S. 061302

- [236] SILBERT, L. E. ; GREST, G.S. ; BREWSTER, R. ; LEVINE, A. J.: Rheology and Contact Lifetimes in Dense Granular Flows. In: Physical Review Letters 99 (2007), Nr. 6, S. 068002
- [237] SINGH, A. ; MAGNANIMO, V. ; SAITOH, K. ; LUDING, S.: Effect of Cohesion on Shear Banding in Quasistatic Granular Materials. In: Physical Review E 90 (2014), Nr. 2, S. 022202
- [238] ODA, M. ; KAZAMA, H.: Microstructure of Shear Bands and its Relation to the Mechanisms of Dilatancy and Failure of Dense Granular Soils. In: Geotechnique 48 (1998), Nr. 4, S. 465–481
- [239] LADE, P.V. ; OVERTON, D.D.: Cementation Effects in Frictional Materials. In: Journal of Geotechnical Engineering 115 (1989), Nr. 10, S. 1373–1387
- [240] FERNANDEZ, A.L. ; SANTAMARINA, J.C.: Effect of Cementation on the Small-strain Parameters of Sands. In: Canadian Geotechnical Journal 38 (2001), Nr. 1, S. 191–199
- [241] JIANG, M. ; ZHANG, W. ; SUN, Y. ; UTILI, S.: An Investigation on Loose Cemented Granular Materials via DEM Analyses. In: Granular Matter 15 (2013), Nr. 1, S. 65–84
- [242] ESTRADA, N. ; LIZCANO, A. ; TABOADA, A.: Simulation of Cemented Granular Materials. II. Micromechanical Description and Strength Mobilization at the Onset of Macroscopic Yielding. In: Physical Review E 82 (2010), S. 011304
- [243] TOPIN, V. ; DELENNE, J. ; RADJAÏ, F. ; BRENDDEL, L. ; MABILLE, F.: Strength and Failure of Cemented Granular Matter. In: The European Physical Journal E: Soft Matter and Biological Physics 23 (2007), S. 413–429
- [244] BRENDDEL, L. ; PENGIRAN, Y. ; ROECK, M. ; WAHL, M. ; BROECKEL, U.: Modeling of Caked Contacts in DEMs. In: Chemical Engineering & Technology 29 (2006), Nr. 11, S. 1355–1359
- [245] WOOD, D.M.: Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics. Cambridge University Press, 1990
- [246] CUCCOVILLO, T. ; COOP, M. R.: On the Mechanics of Structured Sands. In: Géotechnique 49 (1999), Nr. 6, S. 741–760
- [247] LEROUEIL, S. ; VAUGHAN, P.R.: The General and Congruent Effects of Structure in Natural Soils and Weak Rocks. In: Géotechnique 40 (1990), Nr. 3, S. 467–488
- [248] ESTRADA, N. ; TABOADA, A.: Yield Surfaces and Plastic Potentials of Cemented Granular Materials from Discrete Element Simulations. In: Computers and Geotechnics 49 (2013), S. 62 – 69
- [249] VATSALA, A. ; NOVA, R. ; MURTHY, B.R. S.: Elastoplastic Model for Cemented Soils. In: Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering 127 (2001), Nr. 8, S. 679–687

- [250] NOVA, R. ; CASTELLANZA, R. ; TAMAGNINI, C.: A Constitutive Model for Bonded Geomaterials Subject to Mechanical and/or Chemical Degradation. In: International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 27 (2003), Nr. 9, S. 705–732
- [251] FENISTEIN, D. ; MEENT, J. W. d. ; VAN HECKE, M.: Universal and Wide Shear Zones in Granular Bulk Flow. In: Physical Review Letters 92 (2004), S. 094301
- [252] ONSAGER, L.: Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. In: Physical Review 37 (1931), S. 405–426
- [253] ONSAGER, L.: Reciprocal Relations in Irreversible Processes. II. In: Physical Review 38 (1931), S. 2265–2279
- [254] UNGER, T. ; TÖRÖK, J. ; KERTÉSZ, J. ; WOLF, D. E.: Shear Band Formation in Granular Media as a Variational Problem. In: Physical Review Letters 92 (2004), S. 214301
- [255] MOOSAVI, R. ; SHAEBANI, M. R. ; MALEKI, M. ; TÖRÖK, J. ; WOLF, D. E. ; LOSERT, W.: Coexistence and Transition between Shear Zones in Slow Granular Flows. In: Physical Review Letters 111 (2013), S. 148301
- [256] <https://de.wikipedia.org/wiki/Kaliumchlorid> 25.10.2016, 14:15
- [257] WAHL, M. ; KIRSCH, R. ; BROCKEL, U. ; TRAPP, S. ; BOTTLINGER, M.: Caking of Urea Prills. In: Chemical Engineering & Technology 29 (2006), Nr. 6, S. 674–678
- [258] BRÖCKEL, U. ; KIRSCH, R. ; WAHL, M. ; FEISE, H. J.: Formation and Strength of Solid Bridges in Bulk Solids. In: Particulate Science and Technology 26 (2007), Nr. 1, S. 23–32
- [259] TARDOS, G.I. ; GUPTA, R.: Forces Generated in Solidifying Liquid Bridges Between Two Small Particles. In: Powder Technology 87 (1996), Nr. 2, S. 175–180
- [260] PIETSCH, Wolfgang B.: The Strength of Agglomerates Bound by Salt Bridges. In: The Canadian Journal of Chemical Engineering 47 (1969), Nr. 4, S. 403–409
- [261] ROCK, M. ; SCHWEDES, J.: Investigations on the Caking Behaviour of Bulk Solids - Macroscale Experiments. In: Powder Technology 157 (2005), S. 121–127
- [262] WEIGL, B. ; PENGIRAN, Y. ; FEISE, HJ. ; ROCK, M. ; JANSSEN, R.: Comparative Testing of Powder Caking. In: Chemical Engineering & Technology 29 (2006), Nr. 6, S. 686–690
- [263] WAHL, M. ; BROECKE, U. ; BRENDL, L. ; FEISE, H. J. ; WEIGL, B. ; ROECK, M. ; SCHWEDES, J.: Understanding Powder Caking: Predicting Caking Strength from Individual Particle Contacts. In: Powder Technology 188 (2008), Nr. 2, S. 147–152

- [264] TANAKA, T.: Evaluating the Caking Strength of Powders. In: Industrial & Engineering Chemistry Product Research and Development 17 (1978), Nr. 3, S. 241–246
- [265] BRENDL, L. ; TÖRÖK, J. ; KIRSCH, R. ; BRÖCKEL, U.: A Contact Model for the Yielding of Caked Granular Materials. In: Granular Matter 13 (2011), S. 777–786
- [266] BURMEISTER, C. F. ; KWADE, A.: Process Engineering with Planetary Ball Mills. In: Chemical Society Reviews 42 (2013), Nr. 18, S. 7660–7667
- [267] C. SCHILDE, A. K.: Measurement of the Micromechanical Properties of Nanostructured Aggregates via Nanoidentation. In: Journal of Materials Research 27 (2012), Nr. 4, S. 672–684
- [268] HERTZSCH, J.M. ; SPAHN, F. ; BRILLIANTOV, N.V.: On Low-velocity Collisions of Viscoelastic Particles. In: Journal de Physique II 5 (1995), Nr. 11, S. 1725–1738
- [269] WALTON, O.R. ; JOHNSON, S. M.: Simulating the Effects of Interparticle Cohesion in Micron-Scale Powders. In: Powders and Grains, 2009
- [270] PASHA, M. ; DOGBE, S. ; HARE, C. ; HASSANPOUR, A. ; GHADIRI, M.: A New Contact Model for Modelling of Elastic-plastic-adhesive Spheres in Distinct Element Method. In: Powders and Grains, 2013
- [271] HAMAKER, H.C.: The London - Van Der Waals Attraction Between Spherical Particles. In: Physica 4 (1937), Nr. 10, S. 1058–1072
- [272] JOHNSON, D.L. ; NORRIS, A.N.: Rough Elastic Spheres in Contact: Memory Effects and the Transverse Force. In: Journal of the Mechanics and Physics of Solids 45 (1997), Nr. 6, S. 1025–1036
- [273] DAHMEN, S. R. ; FARKAS, Z. ; HINRICHSSEN, H. ; WOLF, D. E.: Macroscopic Diagnostics of Microscopic Friction Phenomena. In: Physical Review E 71 (2005), S. 066602
- [274] SCHOFIELD, A. ; WROTH, P.: Critical State Soil Mechanics. McGraw-Hill London, 1968
- [275] MOLÉRUS, O.: Effect of Interparticle Cohesive Forces on the Flow Behaviour of Powders. In: Powder Technology 20 (1978), Nr. 2, S. 161 – 175
- [276] LUDING, S. ; ALONSO-MARROQUÍN, F.: The Critical-state Yield Stress (Termination Locus) of Adhesive Powders from a Single Numerical Experiment. In: Granular Matter 13 (2011), Nr. 2, S. 109–119
- [277] ROUX, J.-N.: Geometric Origin of Mechanical Properties of Granular Materials. In: Physical Review E 61 (2000), Nr. 6, S. 6802
- [278] LUDING, S.: Anisotropy in Cohesive, Frictional Granular Media. In: Journal of Physics: Condensed Matter 17 (2005), Nr. 24, S. S2623

- [279] SINGH, A ; MAGNANIMO, V ; LUDING, S: A Contact Model for Sticking of Adhesive Mesoscopic Particles. In: Powder Technology (submitted) (2015). – arXiv:1503.03720
- [280] SCHÜTZ, W. ; SCHUBERT, H.: Der Einfluß von Anpreßkräften auf die Partikelhaftung. In: Chemie Ingenieur Technik 48 (1976), Nr. 6, S. 567–567
- [281] KRUPP, H.: Haftung kleiner Feststoffteilchen an Festkörperoberflächen. In: Chemie Ingenieur Technik 39 (1967), Nr. 5-6, S. 374–374
- [282] STREGE, S. ; ZETZENER, H. ; KWADE, A.: From Particle to Powder Properties – A Mesoscopic Approach Combining Micro-scale Experiments and X-ray Microtomography. In: Powders and Grains, 2013
- [283] PARTELI, E.J.R. ; SCHMIDT, J. ; BLÜMEL, C. ; WIRTH, K.-E. ; PEUKERT, W. ; PÖSCHEL, T.: Attractive Particle Interaction Forces and Packing Density of Fine Glass Powders. In: Scientific reports 4 (2014), Nr. 6227
- [284] ELLENBROEK, W. G.: Response of Granular Media Near the Jamming Transition. Leiden Institute of Physics, Institute-Lorentz for Theoretical Physics, Leiden University, 2007
- [285] ASHCROFT, N.W. ; MERMIN, N.D.: Solid State Physics. Holt-Saunders, 1976
- [286] SCHWARTZ, L. ; JOHNSON, D. ; FENG, S.: Vibrational Modes in Granular Materials. In: Physical Review Letters 52 (1984), S. 831–834
- [287] ALEXANDER, S.: Amorphous Solids: Their Structure, Lattice Dynamics and Elasticity. In: Physics Reports 296 (1998), Nr. 2–4, S. 65 – 236
- [288] WYART, M. ; NAGEL, S.R. ; WITTEN, T.A.: Geometric Origin of Excess Low-frequency Vibrational Modes in Weakly Connected Amorphous Solids. In: Europhysics Letters 72 (2005), Nr. 3, S. 486
- [289] SILBERT, L. E. ; LIU, A. J. ; NAGEL, S.R.: Vibrations and Diverging Length Scales Near the Unjamming Transition. In: Physical Review Letters 95 (2005), S. 098301
- [290] WYART, M. ; SILBERT, L. E. ; NAGEL, S. R. ; WITTEN, T. A.: Effects of Compression on The Vibrational Modes of Marginally Jammed Solids. In: Physical Review E 72 (2005), S. 051306
- [291] CIAMARRA, M. P. ; PASTORE, R.. ; NICODEMI, M. ; CONIGLIO, A.: Jamming Phase Diagram for Frictional Particles. In: Physical Review E 84 (2011), S. 041308
- [292] SCHRECK, C.F. ; O’HERN, C. S. ; SHATTUCK, M. D.: Vibrations of Jammed Disk Packings with Hertzian Interactions. In: Granular Matter 16 (2014), Nr. 2, S. 209–216

- [293] HENKES, S. ; VAN HECKE, M. ; VAN SAARLOOS, W.: Critical Jamming of Frictional Grains in the Generalized Isostaticity Picture. In: Europhysics Letters 90 (2010), Nr. 1, S. 14003
- [294] SNOEIJER, J. H. ; ELLENBROEK, W. G. ; VLUGT, T. J. H. ; VAN HECKE, M.: Sheared Force Networks: Anisotropies, Yielding, and Geometry. In: Physical Review Letters 96 (2006), S. 098001
- [295] DURIAN, D.J.: Foam Mechanics at the Bubble Scale. In: Physical Review Letters 75 (1995), Nr. 26, S. 4780
- [296] TIGHE, B. P.: Relaxations and Rheology near Jamming. In: Physical Review Letters 107 (2011), Nr. 15, S. 158303
- [297] GOLDSTEIN, H.: Klassische Mechanik. Bd. 4. Wiesbaden : Akademische Verlagsgesellschaft, 1976
- [298] Persönliche Korrespondenz mit Jens Boberski
- [299] Persönliche Korrespondenz mit Lothar Brendel
- [300] NOLTING, W.: Grundkurs Theoretische Physik 1 (Klassische Mechanik). Bd. 1. 7. Springer, 2004
- [301] DAGOIS-BOHY, S. ; TIGHE, B. P. ; SIMON, J. ; HENKES, S. ; VAN HECKE, M.: Soft-Sphere Packings at Finite Pressure but Unstable to Shear. In: Physical Review Letters 109 (2012), S. 095703
- [302] VAN HECKE, M.: Jamming of Soft Particles: Geometry, Mechanics, Scaling and Isostaticity. In: Journal of Physics: Condensed Matter 22 (2010), Nr. 3, S. 033101
- [303] DEEN, M. S. ; SIMON, J. ; ZERAVCIC, Z. ; DAGOIS-BOHY, S. ; TIGHE, B. P. ; VAN HECKE, M.: Contact changes near jamming. In: Physical Review E 90 (2014), S. 020202
- [304] SCHWAGER, T. ; PÖSCHEL, T.: Coefficient of Restitution for Viscoelastic Spheres: The Effect of Delayed Recovery. In: Physical Review E 78 (2008), Nr. 5, S. 051304
- [305] TABOR, D.: Surface Forces and Surface Interactions. In: Journal of Colloid and Interface Science 58 (1977), Nr. 1, S. 2–13
- [306] LIU, D.-L. ; MARTIN, J. ; BURNHAM, N. A.: Optimal Roughness for Minimal Adhesion. In: Applied Physics Letters 91 (2007), Nr. 4, S. 043107
- [307] BARABÁSI, A.L. ; STANLEY, H.E.: Fractal Concepts in Surface Growth. Cambridge University Press, 1995
- [308] NAYAK, P.R.: Random Process Model of Rough Surfaces. In: Journal of Tribology 93 (1971), Nr. 3, S. 398–407
- [309] PERSSON, N.J. B: Contact Mechanics for Randomly Rough Surfaces. In: Surface Science Reports 61 (2006), Nr. 4, S. 201–227

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle sehr herzlich bei Herrn Prof. Dr. D. E. Wolf dafür bedanken, mir die Forschung an einer solch spannenden Thematik, inklusive der Teilnahme an vielen Konferenzen zum wissenschaftlichen Austausch, ermöglicht zu haben. Ohne die rücksichtsvolle, geduldige, stets freundliche und inspirierende Betreuung sowie die intensive Unterstützung bei der Modellierung von Kaliumchlorid wäre diese Arbeit nicht entstanden.

Darüber hinaus möchte ich unseren Kooperationspartnern im PiKo Projekt Dr. S. Strege, Dr. H. Zetzener und Prof. Dr. A. Kwade aus der Verfahrenstechnik sowie L. Handl, Dr. A. Spettl und Prof. Dr. V. Schmidt aus der Mathematik für die zahlreichen Diskussionen in angenehmer Atmosphäre danken.

Für zahlreiche Anregungen, wertvolle Diskussionen, kritische Anmerkungen und das partielle Korrekturlesen dieser Arbeit möchte ich ganz besonders Dr. Lothar Brendel danken.

Bedanken möchte ich mich auch bei der AG Wolf für die angenehme Arbeitsatmosphäre, im Speziellen bei Dr. Sebastian Angst für die freundschaftliche Zusammenarbeit, die vielen Hilfestellungen und Diskussionen sowie das Korrekturlesen von Kap. 4.3 - 4.6. Weiterer Dank gebührt Dr. Alexander Ries für Anmerkungen und Korrekturen zu Kap. 4.3 sowie Dr. Partrick Kurzeja für die Korrekturen zu Kap. 2.1. Außerdem möchte ich Dr. János Török für die Bereitstellung des *Mozi-Player* sowie die Integration des mozi-Dateiformats in LAMMPS danken.

Schließlich gebührt besonderer Dank meiner Mutter für die herzliche Unterstützung, meinem Bruder für das Korrekturlesen von Kap. 5 - 6 sowie meiner Freundin für Korrekturen und Rücksichtnahme.